



Уральский  
федеральный  
университет

имени первого Президента  
России Б. Н. Ельцина

Институт радиоэлектроники  
и информационных  
технологий — РТФ

# ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Учебное пособие



Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации

Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

# **ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**

Учебное пособие

Рекомендовано методическим советом  
Уральского федерального университета  
для студентов вуза,  
обучающихся по направлениям подготовки  
09.03.01 — Информатика и вычислительная техника,  
09.04.02 — Информационные системы и технологии

Екатеринбург  
Издательство Уральского университета  
2021

УДК 004.032.26:66.017

ББК 32.818.1+30.3

П76

Авторы:

А. Г. Тягунов, О. Б. Мильдер, Д. А. Тарасов, А. П. Сергеев

Рецензенты:

*Л. М. Мартюшев*, д-р физ.-мат. наук, ведущ. науч. сотр. Института промышленной экологии УрО РАН;

*Е. Н. Акимова*, д-р физ.-мат. наук, ведущ. науч. сотр. Института математики и механики УрО РАН

Научный редактор — канд. физ.-мат. наук, доц. *Ю. Н. Колмогоров*

**Применение искусственных нейронных сетей в материаловедении** : учеб. пособие / А. Г. Тягунов, О. Б. Мильдер, Д. А. Тарасов, А. П. Сергеев ; М-во науки и высш. обр. РФ. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2021. — 68 с.

ISBN 978-5-7996-3337-0

В учебном пособии описаны история возникновения и базовые подходы к реализации методов машинного обучения, а именно — искусственных нейронных сетей. Предложено использование данного подхода в материаловедении, в моделировании свойств сложнолегированных жаропрочных сплавов на основе никеля. Дана общая характеристика сплавов, их состава и свойств. Описана методика моделирования жаропрочности никелевых сплавов на основе искусственной нейронной сети типа многослойного перцептрона.

УДК 004.032.26:66.017

ББК 32.818.1+30.3

ISBN 978-5-7996-3337-0

© Уральский федеральный  
университет, 2021

## Введение

---

**М**ашинное обучение (МО, англ. *machine learning*, ML) — класс методов искусственного интеллекта, характерной чертой которых является не прямое решение задачи, а обучение в процессе применения решений множества сходных задач. Для построения таких методов используются средства математической статистики, численных методов, методов оптимизации, теории вероятностей, теории графов, различные техники работы с данными в цифровой форме. Частным случаем методов машинного обучения являются искусственные нейронные сети (ИНС), которые завоевали большую популярность благодаря своей сравнительно несложной реализации, доступности в большом числе прикладных программных пакетов (*Statistica*, *Matlab* и пр.), а также из-за все повышающейся производительности вычислительных систем, позволяющих сегодня в режиме реального времени решать задачи, на которые еще 10 лет назад тратились дни и недели вычислений. Из чисто академического объекта ИНС давно стали удобным инструментом прикладных вычислений и моделирования. Большое разнообразие типов и конфигураций ИНС позволяет подобрать сеть, удовлетворительно решающую ту или иную задачу моделирования. Развитие языков программирования и средств программной разработки привело также к увеличению числа программных библиотек, содержащих различные примитивы ИНС и МО, которые могут быть относительно легко помещены в программный продукт. Все это делает методы машинного обучения гибким и широко доступным инструментом.

В этом пособии описаны азы построения искусственных нейронных сетей и на конкретном примере предложена возможность их применения в научно-технической практике.

# Глава 1. Искусственные нейроны, сети и их биологические прототипы

---

## 1.1. Биологический нейрон

---

**Н**ервные клетки биологических организмов, или нейроны, являются базовыми элементами нервной системы, основными обработчиками и передатчиками информации. Например, нервная система человека состоит примерно из ста миллиардов нервных клеток, каждая из которых является базовой коммуникационной единицей нервной системы.

Нейроны бывают разных типов, и каждый из них предназначен для выполнения определенной функции.

Рецепторные нейроны органов чувств воспринимают извне определенные виды энергии (свет, давление, химическую энергию и т. д.) и трансдуцируют (преобразуют) эту поглощенную энергию в нервные импульсы, направляемые затем другим нейронам нервной системы. Трансдукция — это превращение физической энергии в нейронную форму стимулирования, осуществляемое специализированными органами чувств.

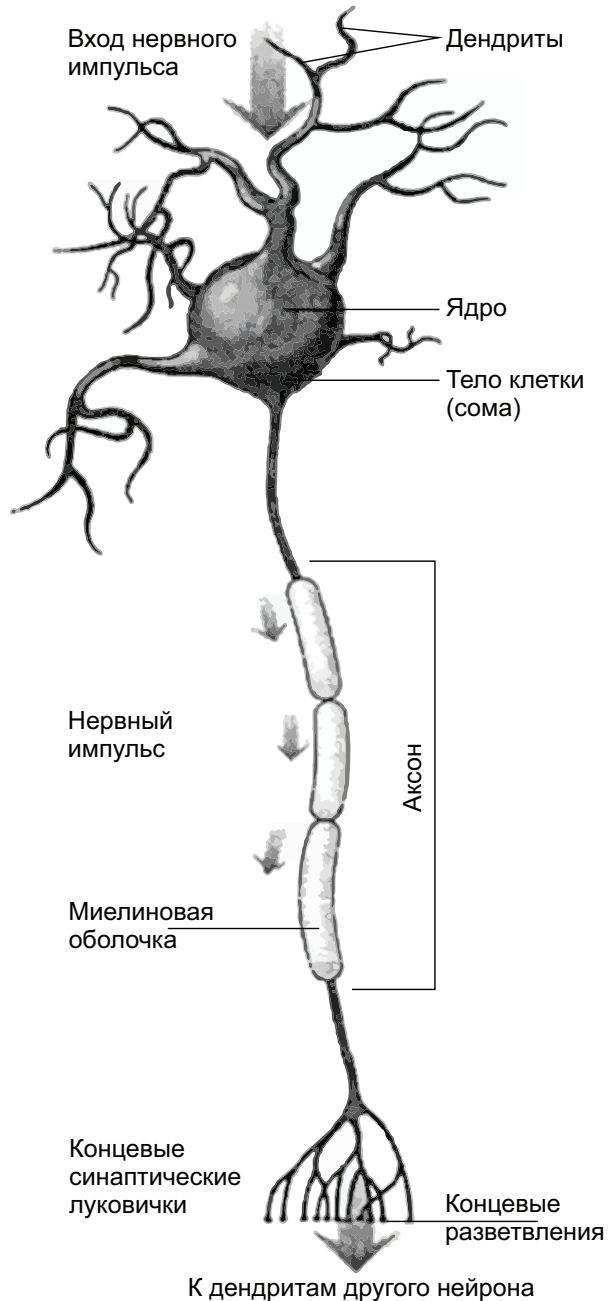
Сенсорные нейроны передают информацию от сенсорных рецепторов мозгу, мотонейроны — от мозга мышцам, а интернейроны осуществляют обмен информацией между нейронами.

Большинство нейронов, независимо от их функции, состоит из отдельной клетки, имеющей три отличные друг от друга части (рис. 1.1):

- 1) тело клетки, или сома, содержащее ядро клетки, которое регулирует химическую активность нейрона, а также принимает и сохраняет получаемую им информацию;

- 2) отходящие от тела клетки, разветвленные структуры, называемые дендритами (от греч. *dendron* — дерево), которые принимают информацию от других клеток и осуществляют связь с ними;

3) аксоны — тонкие длинные волокна, по которым информация поступает от сомы к другим нейронам.



**Рис. 1.1.** Биологический нейрон (цит. по [1])

Аксоны передают информацию от нейрона. При этом они либо направляют ее соседним нейронам, либо мышце или железе, «приказывая» совершить то или иное действие. Длина большинства аксонов не превышает 0,1 мм, однако некоторые аксоны нервной системы взрослого человека достигают метровой длины. Обычно аксоны связаны с дендритами других нервных клеток и передают им импульсы, т.е. аксон — элемент коммуникационной системы нейрона, передающий за пределы клетки информацию в виде нервного импульса, а дендриты «доставляют» информацию внутрь, в тело нервной клетки. Аксоны многих нейронов покрыты слоем миелина — белково-жирового комплекса, образованного защитными и питательными клетками и создающего изолирующую оболочку вокруг аксона. Благодаря этой оболочке скорость прохождения нервного импульса по нейрону значительно увеличивается.

Разветвленный конец аксона имеет древовидную форму, и каждая ветвь заканчивается концевой синаптической луковишкой. Это место соединения аксона с дендритом другой нервной клетки [1, с. 39–49; 2].

## 1.2. Нейронная передача

---

Основа всех сенсорных процессов, таких как зрение, слух, обоняние, осязание и других, — это передача информации. Информация в виде нервных импульсов передается по нейронам в результате сложного взаимодействия электрических и химических зарядов.

Нервный импульс возникает в результате изменения концентрации катионов натрия ( $\text{Na}^+$ ) и калия ( $\text{K}^+$ ) внутри и снаружи нейрона. Для неактивного (нестимулированного) нейрона характерны разные концентрации ионов внутри и снаружи, причем концентрация отрицательно заряженных ионов вне клеточной мембраны несколько выше, чем внутри. Результатом подобного неравенства концентраций является возникновение разности потенциалов на мембране клетки. Электрический заряд внутри нервной клетки человека отличается от внешнего заряда примерно на  $-70$  мВ. Этот потенциал неактивного нейрона называется *потенциалом покоя* (или мембранным потенциалом).

При воздействии раздражителя или приходе импульса от соседнего аксона внутри нейрона возникает избыточный, по сравнению со средой, положительный заряд, и потенциал покоя за доли секунды изме-



няется. При этом возникает электрический заряд, который с большой скоростью перемещается по аксону, после чего потенциал возвращается в исходное состояние. Быстрое изменение электрического заряда — это первая стадия возбуждения нейрона и передачи информации с помощью аксона внутри нервной системы. Подобный механизм характерен для всех сенсорных систем [1, с. 39–49; 2]. Волна возбуждения, перемещающаяся по мембране живой клетки в виде кратковременного изменения мембранного потенциала на небольшом участке нейрона, в результате которого наружная поверхность этого участка становится отрицательно заряженной по отношению к внутренней поверхности мембраны, в то время, как в покое она заряжена положительно, называется *потенциалом действия*.

### **1.3. Потенциал действия**

Потенциал действия возникает не при любом уровне генерации электрического разряда в нервной клетке при воздействии раздражителя или приходе сигнала от других нейронов. Возникновение в нейроне потенциала действия и передача импульса возможны лишь тогда, когда достигнут определенный пороговый уровень его стимулирования. Минимальный уровень стимулирования, необходимый для возбуждения нейрона, называется *нейронным порогом*.

Если внутри нервной клетки накапливается электрический заряд, превышающий нейронный порог, этот заряд сохраняется в течение одной миллисекунды, затем электрическое состояние нейрона быстро изменяется. Это изменение называется потенциалом действия, а также пиковым потенциалом, или *спайком* (от английского *spike* — шип), поскольку в определенный момент электрический заряд нейрона быстро достигает пика, а затем быстро падает.

Потенциалы действия подчиняются триггерному принципу «все или ничего». Если электрический заряд достигает нейронного порога, то возникает потенциал действия и посылается импульс. С другой стороны, если общий электрический заряд падает ниже критического значения нейронного порога, то потенциал действия не возникает. Иными словами, нейрон либо генерирует потенциал действия, либо нет, т. е. выступает определенным «триггером».

Величина потенциала действия не зависит от интенсивности раздражителя, т. е. является постоянной величиной. Однако очевидно, что раздражители, например, воздействующие на сенсорную систему человека, по своей интенсивности существенно отличаются друг от друга — от едва уловимых до чрезвычайно сильных. Каким же образом в этом случае пороговый характер потенциала действия отражает интенсивность физического раздражителя? На самом деле влияние интенсивности раздражителя проявляется не в величине (амплитуде) сигнала, а в количестве потенциалов действия во временном интервале между ними, т. е. в частоте следования импульсов. Чем сильнее раздражитель, тем выше частота следования импульсов потенциалов действия [1, с. 39–49; 2].

#### **1.4. Адаптация**

---

Продолжительность ощущения зависит от времени генерирования потенциалов действия, т. е. оно сохраняется дольше при более продолжительном периоде генерации. Однако при слишком продолжительном воздействии сенсорные рецепторы становятся менее чувствительными. Это приводит к уменьшению скорости возникновения потенциалов действия и, как следствие, к снижению интенсивности ощущения. Подобное уменьшение чувствительности вследствие продолжительного воздействия постоянного по интенсивности раздражителя называется *адаптацией* и является общим для всех сенсорных модальностей. Более того, при постоянно действующем в течение длительного времени раздражителе ощущение может и вовсе исчезнуть. Так, например, при длительном нахождении в помещении, где присутствует какой-либо постоянный шум (шумит вентилятор, кондиционер, гудит дроссель люминесцентной лампы и т. п.), звук шума постепенно начинает казаться все менее громким и в конце концов человек перестает его замечать. Необходимо отметить, что более слабые стимулы перестают восприниматься быстрее, чем более сильные.

К адаптации способны все сенсорные модальности, но в различной степени. Например, к тактильным ощущениям и запаху адаптация наступает относительно быстро, а к боли привыкнуть гораздо труднее или вообще возможно.

Несмотря на то, что адаптация, как правило, свидетельствует о снижении чувствительности, она одновременно приносит и определенную пользу. Неизменный раздражитель с течением времени лишается информативности и даже может начать отвлекать внимание. Снижая его восприятие, адаптация помогает выделить сигналы, свидетельствующие о переменах в окружающем мире, что, например, более важно для выживания в дикой природе. Сенсорная система человека не только способна к адаптации, но и чрезвычайно чувствительна даже к самой незначительной смене сигнала.

### **1.5. Рефрактерный период**

---

Потенциалы действия ограничены во времени. После возникновения одного потенциала действия второй может возникнуть не ранее чем через 1 миллисекунду. Этот короткий промежуток времени, когда нейрон неактивен, называется рефрактерным периодом. Рефрактерный период ограничивает и максимальную частоту возникновения импульсов величиной в 1000 потенциалов действия в секунду или менее. Когда речь идет о нервном возбуждении, именно это обстоятельство определяет «пропускную способность» сенсорной системы в 1000 *спайков* в секунду [1, с. 39–49].

### **1.6. Скорость нейронной трансмиссии**

---

У млекопитающих по демиелинизированному аксону нейронный импульс (потенциал действия) перемещается за 2–3 мс. В аксонах с миелиновой оболочкой, играющей роль «электроизолятора», скорость прохождения потенциалов действия значительно выше, в них скорость перемещения превышает 100 м/с. У человека миелинизирование аксонов завершается примерно к 12 годам, что отчасти является причиной того, что дети не могут учиться или реагировать столь же быстро или действовать столь же целеустремленно, как взрослые: скоростных способностей их нервной системы просто не хватает для решения некоторых «взрослых» задач. Такие заболевания, как рассеянный склероз, раз-

рушают миелиновую оболочку, что приводит к уменьшению скорости передачи потенциалов действия и возможной потере сенсорно-моторной координации, для которой требуется интеграция нервной системы.

## 1.7. Синаптические связи

Вся сенсорная и моторная активность человека координируется совместными действиями нейронной сети, состоящей из миллиардов нервных клеток. Как происходит взаимодействие и передача информации между нейронами?

Потенциал действия создает импульс, который распространяется вдоль нейронной мембраны и далее продвигается по аксону до концевой синаптической луковички (рис. 1.2). Трансфер импульса от аксона передающего (пресинаптического) нейрона к дендриту принимающего (постсинаптического) нейрона происходит химически через область контакта, называемую *синапсом* (от греч. *synapsis* — «соединение»).



**Рис. 1.2.** Схематическое изображение нейронной трансмиссии в синапсе (цит. по [1])

На рисунке 1.2 представлен схематический вид синапса, на котором можно выделить синаптическую щель (синаптическое пространство) — микроскопический зазор между концевыми синаптическими луковичками пресинаптического нейрона и клеточной мембраной постсинаптического нейрона.

Когда потенциал действия доходит до конца аксона, на котором расположены *синаптические луковички*, из микроскопических синаптических пузырьков (камер) на них выделяется некоторое количество химических веществ-нейротрансмиттеров, которые заполняют синаптическую щель и стимулируют прилегающий к нему постсинаптический нейрон, «замыкая» электрическую цепь и обеспечивая тем самым прохождение нервного импульса.

## **1.8. Нейротрансмиттеры**

Нейротрансмиттеры могут либо возбуждать, либо тормозить активность постсинаптического нейрона. При возбуждении потенциалом действия возбуждающего синапса происходит выделение трансммиттеров, возбуждающих постсинаптический нейрон. Наоборот, при возбуждении тормозного синапса выделяется нейротрансмиттер, который ингибирует постсинаптический нейрон, в результате чего уменьшается вероятность передачи через него потенциала действия.

Ацетилхолин (АХ) является одним из важных возбуждающих трансммиттеров, на который оказывают заметное влияние такие вещества, как кофеин и кокаин. Агонисты — это вещества, усиливающие эффект специфического нейротрансмиттера. Ацетилхолин обнаружен в синапсах мозга, и доказано его участие в таких процессах, как память, внимание и пробуждение. Ацетилхолин также вызывает скелетно-мышечную активность за счет действия на двигательные нервы, и это лишь некоторые из его функций. Кураре, сильнодействующий яд, вызывающий паралич, является антагонистом, веществом, ингибирующим ацетилхолин. Кураре иногда используют аборигены Южной Америки, живущие в бассейне реки Амазонки. Он селективно блокирует действие ацетилхолина тем, что препятствует его проникновению в синапсы нейронов нервов и мышц, в результате чего наступает полный паралич.

Норепинефрин (НЭ) — другой важный возбуждающий нейротрансмиттер, участвующий в процессе пробуждения и обеспечивающий готовность к действию. Хорошо известно, что кокаин и амфетаамфетамин, действуя как агонисты, продлевают действие норепинефрина, что еще более усиливает ярко выраженные стимулирующие психологические эффекты этих препаратов.

Гамма-аминомасляная кислота (ГАМК) является основным ингибирующим нейротрансмиттером. Она тормозит возникновение потенциала действия в нейронах, помогая тем самым контролировать точность движений мышц. Без ингибирующего действия ГАМК нервные импульсы становятся менее точными, и мышечная активность становится хаотичной, дискоординированной и даже конвульсивной.

Эндорфин — другой ингибирующий нейротрансмиттер, который блокирует нервные пути, проводящие боль. Такие широко известные вещества, как барбитураты и алкоголь, также играют роль антагонистов, поскольку подавляют выделение трансммиттеров [1, с. 39–49].

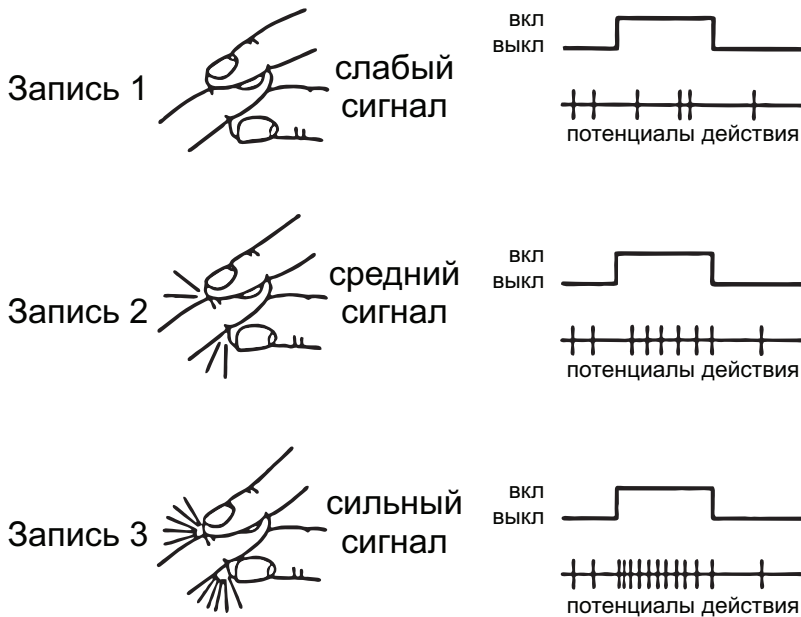
## **1.9. Измерение потенциала действия**

---

Нейронно-электрические сигналы потенциалов действия, генерируемые отдельными нейронами, формируют специфический сенсорный код, обеспечивающий функционирование нервной системы, и часто используются для непосредственных оценок сенсорной нейронной активности. Как правило, эти сигналы регистрируются при помощи точных, чувствительных приборов, способных улавливать очень слабые электрические сигналы. Одним из таких инструментов служит микроэлектрод, представляющий собой тонкую металлическую проволоку с кончиком, диаметр которого менее 1 мкм. Микроэлектрод вводят в сому нейрона, подающего сигнал, или в аксон. Электрическая активность регистрируется с помощью вольтметра и осциллографа, фиксирующих изменение электрического заряда нейрона во времени и частоту импульсов потенциала действия в виде ритмической картины спайковых потенциалов.

На рисунке 1.3 представлены результаты трех таких экспериментов, в которых с помощью микроэлектрода определялась активность одного и того же нейрона, реагирующего по-разному в зависимости

от интенсивности сжатия пальца. Эти осциллограммы нейронной активности свидетельствуют о том, что по мере увеличения давления на палец увеличивается частота импульсов потенциала действия и изменяется ощущение.



**Рис. 1.3.** Частота спайков в зависимости от силы сжатия пальца (цит. по [1])

Запись 1 соответствует легкому прикосновению к пальцу. Результатом такого прикосновения является слабое ощущение, и частота импульсов потенциала действия очень низкая.

Запись 2 соответствует более сильному сжатию пальца, при этом испытуемый чувствует оказываемое на палец давление, и частота импульсов потенциала действия возрастает.

Запись 3 соответствует еще более сильному сжатию, при этом ощущается сильное давление (а возможно, и боль), и частота импульсов потенциала действия сравнительно высока. Из рисунка 1.3 видно, что величина потенциалов действия (высота пиков на осциллограмме) одинакова для всех записей, но их частота следования (число потенциалов действия в единицу времени) изменяется в зависимости от интенсивности раздражителя. Таким образом, частота импульсов потенциалов действия отражает и интенсивность раздражителя, и силу ощущения [1, с. 39–49].



## 1.10. Сенсорно-нейронная передача

---

Каждый нейрон посредством синаптических связей может быть связан с тысячами других нейронов. Поскольку в мозгу человека примерно сто миллиардов нейронов, общее количество связей в нервной системе по меньшей мере  $10^{14}$ . С. П. Томпсон на основе этих расчетов пришел к выводу, что «количество возможных разных синаптических соединений между нейронами мозга одного человека превышает общее число атомных частиц, образующих исследованную Вселенную» [1, с. 39–49]. Создается впечатление, что способность нейронов к созданию сложных связей друг с другом практически безгранична и именно этим объясняются чрезвычайное разнообразие функций нервной системы и ее сенсорные возможности.

Основной обрабатывающий информацию центр в организме человека — это мозг. Электрические сигналы практически из каждого нейрона поступают в мозг благодаря нервам, трактам и ядрам центральной нервной системы (ЦНС).

Нерв представляет собой пучок аксонов, образующих путь, по которому сигналы нейронов передаются между различными участками нервной системы. Сенсорная информация передается нервами в ЦНС, состоящую из спинного и головного мозга.

Наряду с сенсорными и моторными нейронами существуют сенсорные и моторные нервы. Сенсорные нервы, называемые также афферентными нервами (от латинского *affere* — «приносить»), передают сенсорную информацию головному и спинному мозгу, обеспечивая сенсорный опыт человека. Двигательные, или эфферентные, нервы (от латинского *effere* — «выносить») передают информацию из головного и спинного мозга таким эфферентам, как мышцы и сухожилия, формируя двигательную активность.

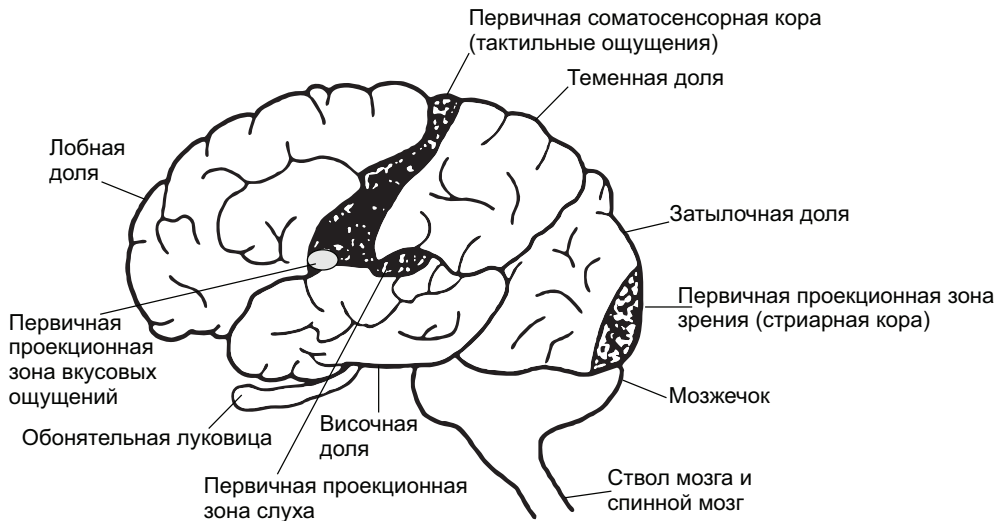
Для обозначения путей передачи сигнала в ЦНС обычно вместо термина «нервы» используется термин «тракты». Кроме того, в центральной нервной системе много отделов, в которых синаптические связи образуются большими группами нейронов, называемых ядрами. Функция ядер — обработка, интеграция, трансформация и даже простейший анализ полученной сенсорной информации. Одним из важнейших ядер, в которых переключаются афферентные нервные пути, является *таламус*, расположенный в переднем мозге, ниже центра его



полушарий. Он состоит из нескольких отделов, каждый из которых связан с определенной сенсорной модальностью. Таким образом, *та-ламус* является подкорковым центром всех видов чувствительности.

Сигналы, передаваемые аксонами нейронов, поступают в определенные отделы коры головного мозга. Кора головного мозга (от латинского *cortex* — «кора дерева») представляет собой тонкую внешнюю оболочку полушарий мозга. Ее толщина не превышает 2 мм, но, будучи весьма извилистой, или складчатой, она занимает площадь, равную примерно от 1468 до 1670 см<sup>2</sup>.

Первичные проекционные зоны коры — это высокоспецифичные отделы мозга, которые связаны исключительно с определенными сенсорными модальностями. Основные проекционные зоны всех сенсорных систем лежат внутри определенных долей коры мозга (рис. 1.4).



**Рис. 1.4.** Левое полушарие головного мозга человека (цит. по [1]):

показаны четыре основные доли (обведены жирными линиями) и первичные проекционные зоны (серый цвет) — специфические отделы мозга, обеспечивающие возможность слышать и видеть, а также испытывать тактильные ощущения и ощущать вкус

Доля — это анатомически различимая зона коры мозга, выполняющая специфическую функцию. Первичная проекционная, или принимающая, зона для слуха находится в височной доле; первичная проекционная зона для тактильных ощущений (соматосенсорная кора) — в теменной доле; первичная проекционная зона зрения — в затылочной доле (стриарной коре), а отделом мозга, связанным с воспри-

ятием запахов, является обонятельная луковица, расположенная ниже височной доли, информация из которой проецируется на несколько отделов мозга.

### **1.11. Искусственные нейроны и нейронные сети**

---

На основе анализа деятельности биологического нейрона Мак Каллах и У. Питтс в 1943 году предложили идею реализации искусственного нейрона [3], проведя параллели между входными сигналами искусственного нейрона и сигналами, посылаемым от биологического нейрона через его аксон. Ф. Розенблатт на основе этой идеи создал первый модуль из искусственных нейронов со связями и назвал его «перцептрон» [4]. Именно перцептрон стал прообразом большинства современных искусственных нейронов. Множество искусственных нейронов, так же по аналогии с сетью биологических нейронов в мозгу, может быть объединено между собой, формируя искусственную нейронную сеть (ИНС).

ИНС были изначально предложены как способ моделирования деятельности человеческого мозга. Однако до сих пор деятельность такой сложной структуры, как человеческий мозг, детально не описана и продолжает интенсивно исследоваться. Поэтому пока нейронные вычислительные модели лишь в самых общих чертах напоминают реальные биологические системы. Тем не менее, они смогли стать самостоятельным вычислительным инструментом, используя главную особенность мозга — способность учиться.

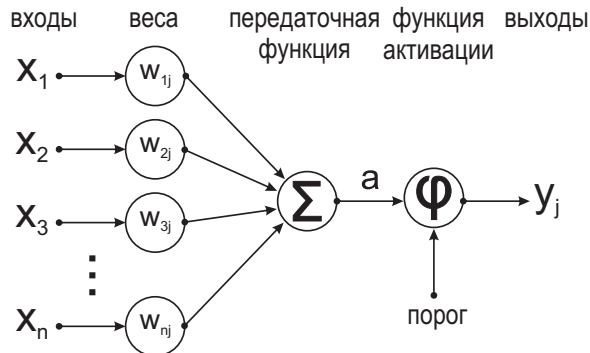
### **1.12. Архитектура нейронной сети**

---

ИНС состоит из определенного количества искусственных нейронов (называемых также обрабатывающими элементами), организованных различными путями для формирования определенной структуры сети, отвечающей решаемым задачам.

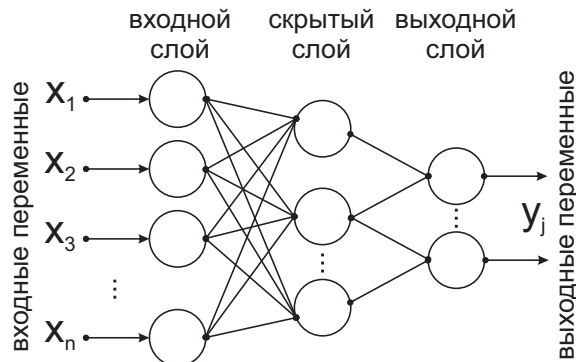
Каждый из нейронов получает входные сигналы, обрабатывает их и выдает простой выходной сигнал. Входным сигналом могут быть необ-

работанные («сырые») данные или выходные сигналы других (предыдущих) нейронов. Таким образом, выходной сигнал искусственного нейрона может являться как конечным результатом действия сети, так и входным сигналом для следующего нейрона. Схема обработки информации в искусственном нейроне типа «перцептрон» показана на рис. 1.5.

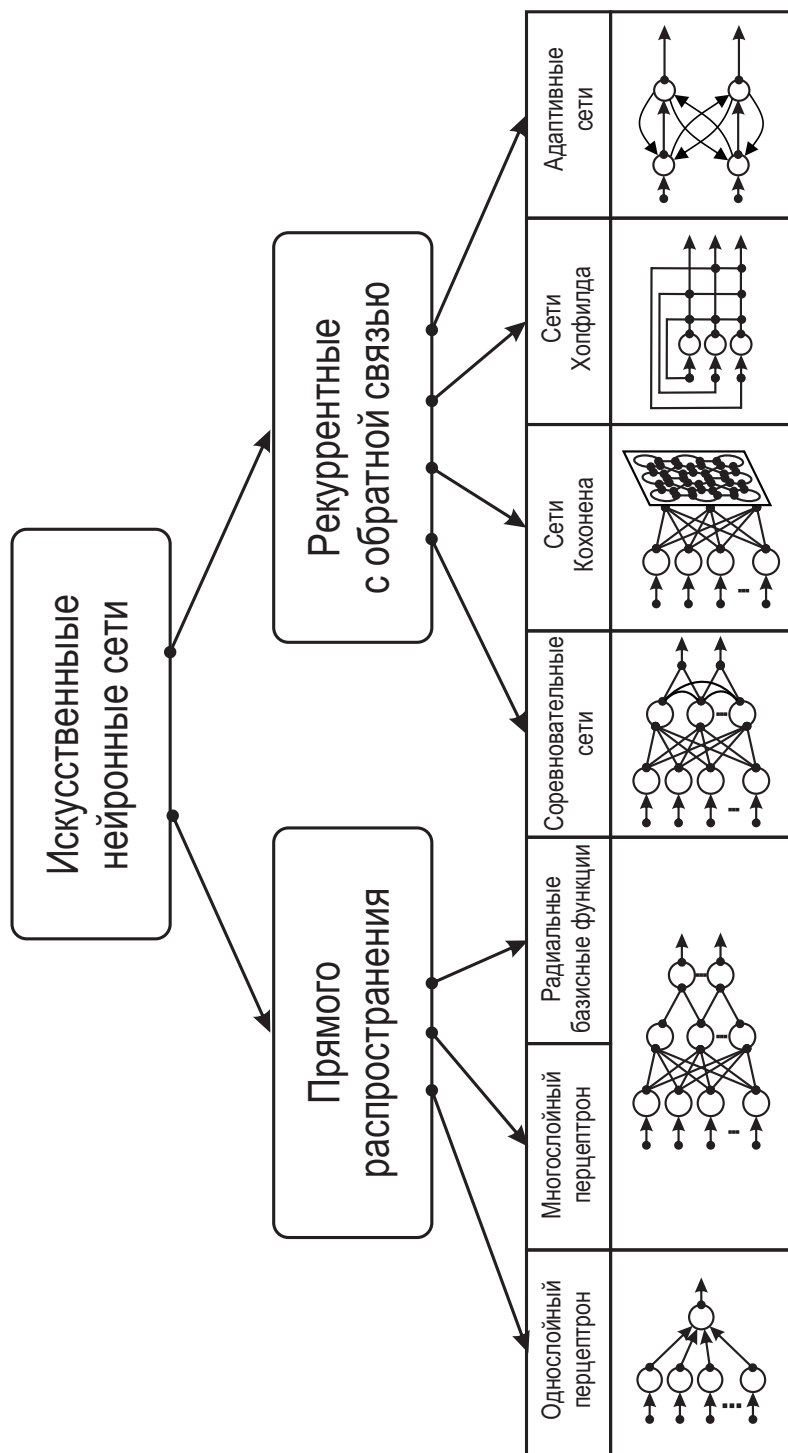


**Рис. 1.5.** Схема обработки информации в искусственном нейроне

Каждая ИНС обычно состоит из набора нейронов, которые сгруппированы по слоям. Типичная структура ИНС показана на рис. 1.6. Здесь представлены три слоя нейронов (обозначены кругами): входной, промежуточный (называемый скрытым слоем) [5] и выходной. Между входным и выходным слоями может быть размещено несколько скрытых слоев. Такой тип организации искусственной нейронной сети называется «многослойный перцептрон». Этот тип ИНС является базовым и подходы на основе применения этой модели разработаны, вероятно, наиболее полно [6–9].



**Рис. 1.6.** Нейронная сеть с одним скрытым слоем



**Рис. 1.7.** Систематизация архитектур сетей прямого распространения и рекуррентных сетей с обратной связью

При обработке информации многие обрабатывающие элементы могут выполнять свои вычисления одновременно или параллельно. Такая обработка имеет сходство с тем, как работает мозг, и отличается от последовательной обработки при традиционных вычислениях. Именно эта особенность позволяет объединять нейроны в слои.

Как и биологические нейронные сети, ИНС могут быть организованы различными способами (иметь разную топологию или архитектуру). При этом меняются взаимосвязи между нейронами, и это проявляется в различных конфигурациях ИНС, имеющих разные названия.

ИНС может рассматриваться как направленный граф со взвешенными связями, в котором искусственные нейроны являются узлами. По архитектуре связей ИНС могут быть сгруппированы в два крупных класса: сети прямого распространения, в которых графы не имеют петель, и рекуррентные сети, или сети с обратными связями (рис. 1.7).

Однонаправленные связи и наличие слоев характеризуют сети прямого распространения, к которым относится уже известный многослойный перцептрон, а также, например, искусственная сеть радиально-базисных функций. Сети прямого распространения являются статическими в том смысле, что на заданный вход они вырабатывают одну совокупность выходных значений, не зависящих от предыдущего состояния сети. Второй класс сетей — рекуррентные сети с обратными связями, — наоборот, являются динамическими, так как в силу наличия обратных связей в них модифицируются входы нейронов, что приводит к изменению состояния сети, таким образом, передается информация о предыдущем состоянии сети, которое влияет на получаемый результат.

### **1.13. Обучение в нейронных сетях**

Способность к обучению является фундаментальным свойством мозга. Это свойство также ключевое для искусственных нейронных сетей. Оно выгодно выделяет их среди других вычислительных моделей, использующих статические, детерминированные подходы. В контексте ИНС процесс обучения может рассматриваться как настройка архитектуры сети и/или весов связей для эффективного выполнения поставленной задачи. Обычно обучение нейронной сети осуществля-

ется итеративной (в один или несколько этапов) настройкой весов связей по некоторой имеющейся выборке, называемой «обучающей».

Следует отметить, что правильно сформулированный и подготовленный процесс обучения является не менее важным в получении точного результата вычислений (моделирования), чем правильно выбранная архитектура сети. Для подготовки обучения необходимо иметь четкое представление о модельном объекте, условиях окружающей среды, ограничениях, другую априорную информацию, которую можно использовать в обучении и настройке ИНС. Кроме того, необходимо четко представлять топологию и конфигурацию сети, правила обучения и целевые показатели весов с тем, чтобы верно направить алгоритм их настройки.

Существуют три основные парадигмы обучения ИНС: «с учителем», «без учителя» (самообучение) и смешанная. В первом случае нейронная сеть располагает заданными правильными ответами (выходами сети) на каждый конкретный входной пример. Веса в этом случае настраиваются так, чтобы сеть производила ответы как можно более близкие к известным правильным ответам. При этом возможна настройка как экстраполяционной, так и интерполяционной моделей, дающих различную точность. Усиленный вариант обучения «с учителем» предполагает, что известна только критическая оценка правильности выхода нейронной сети, но не сами правильные значения выхода.

Обучение «без учителя» не требует знания точных правильных ответов на каждый пример обучающей выборки. В этом случае раскрывается внутренняя структура данных или корреляции между образцами в системе данных, что позволяет распределить образцы по категориям. Такой алгоритм более подходит для задач классификации. При смешанном обучении часть весов определяется посредством обучения с учителем, в то время как остальная получается с помощью самообучения.

Теория обучения рассматривает три фундаментальных свойства, связанных с обучением по примерам: емкость, сложность образцов и вычислительная сложность. Под емкостью понимается, сколько образцов может запомнить сеть, и какие функции и границы принятия решений могут быть на ней сформированы. Сложность образцов определяет число обучающих примеров, необходимых для достижения способности сети к обобщению. Слишком малое число примеров

может вызвать «переобучение» сети, когда она хорошо функционирует на примерах обучающей выборки, но плохо — на тестовых примерах, подчиненных тому же статистическому распределению.

Известны четыре основных типа правил обучения: коррекция по ошибке, машина Больцмана, правило Хебба и обучение методом соревнования.

1. Правило коррекции по ошибке. При обучении с учителем для каждого входного примера задан желаемый выход  $d$ . Реальный выход сети  $y$  может не совпадать с желаемым. Принцип коррекции по ошибке при обучении состоит в использовании сигнала  $(d-y)$  для модификации весов, обеспечивающей постепенное (итеративное) уменьшение ошибки. Обучение осуществляется только в случае если перцептрон выдает ошибочное значение. Известны несколько различных модификаций этого алгоритма обучения.

2. Машина Больцмана [10]. Этот принцип представляет собой стохастическое правило обучения, которое следует из информационных теоретических и термодинамических принципов. Целью обучения Больцмана является такая настройка весовых коэффициентов, при которой состояния видимых нейронов удовлетворяют желаемому распределению вероятностей. Обучение Больцмана может рассматриваться как специальный случай коррекции по ошибке, в котором под ошибкой понимается расхождение корреляций состояний в двух режимах.

3. Правило Хебба. Самым старым обучающим правилом является постулат обучения Хебба [11, с. 62]. Хебб опирался на следующие нейрофизиологические наблюдения: если нейроны с обеих сторон синапса активизируются одновременно и регулярно, то сила синаптической связи возрастает. Важной особенностью этого правила является то, что изменение синаптического веса зависит только от активности нейронов, которые связаны данным синапсом.

4. Обучение методом соревнования. В отличие от обучения Хебба, в котором множество выходных нейронов могут возбуждаться одновременно, при соревновательном обучении выходные нейроны соревнуются между собой за активизацию. Это явление известно как правило «победитель забирает все». Подобное обучение имеет место в биологических нейронных сетях. Обучение посредством соревнования позволяет кластеризовать входные данные: подобные примеры группируются сетью в соответствии с корреляциями и представляются одним элементом. При обучении модифицируются только веса «победившего» ней-

рона. Эффект этого правила достигается за счет такого изменения сохраненного в сети образца (вектора весов связей победившего нейрона), при котором он становится чуть ближе ко входному параметру.

Можно утверждать, что именно способ обучения ИНС вместе с корректной подготовкой входных данных ответственны за получение точного результата действия сети, а выбор конкретной конфигурации ИНС вторичен. Богатство подходов к организации алгоритмов обучения очень велико [12, 13] и требует отдельного внимания.

Начало эры персональных компьютеров существенно облегчило доступ исследователей к применению методов ИНС. Кроме регрессионных моделей на основе ИНС, появились разнообразные методы классификации, фильтрации, идентификации, а также управления и контроля. Сегодня спектр применения ИНС охватывает практически все сферы жизни, и их продолжающееся все более глубокое проникновение в системы принятия решений, управления и анализа сложно переоценить. Все это требует постоянной модификации имеющихся и разработки новых вариаций типов сетей, алгоритмов обучения и методов их применения. Однако классические сети (перцептроны и другие) не сдают позиций и также продолжают активно применяться в самых разнообразных областях. Именно многослойные перцептроны являются основой моделей, описанных в гл. 2.

Искусственные нейронные сети, как и вообще методы машинного обучения, довольно широко представлены в сфере ИТ, однако исследователи в области инженерных и материаловедческих задач до сих пор привлекают эти методы достаточно редко. Во многом это связано с относительной сложностью быстрой реализации ИНС в использующихся программных пакетах, недостаточным объемом и надежностью результатов экспериментов, формирующих обучающие образцы, а также большой вариабельностью типов сетей и методов их обучения, усложняющих выбор основы для моделирования. Мы постарались в этом пособии свести воедино описание сложной материаловедческой задачи прогнозирования свойств жаропрочных никелевых сплавов на основе информации об их элементном составе, пошаговое ее решение с привлечением простейшей конфигурации ИНС типа многослойный перцептрон, и интерпретации полученных результатов моделирования. Этот опыт позволит начинающим или опытным исследователям, используя наши наработки, приступить к реализации подобных задач с использованием имеющегося и широкодоступного инструментария.



## **Контрольные вопросы к главе 1**

---

1. Укажите структуру и типы биологических нейронов, синаптические связи.
2. Что называют нейронной передачей, скоростью нейронной трансмиссии?
3. Что такое потенциал действия, адаптация и рефрактерный период?
4. В чем суть сенсорно-нейронной передачи в ЦНС?
5. Опишите историю создания искусственного нейрона и перцептрона.
6. Опишите характерные искусственные нейронные сети и некоторые их архитектуры.
7. Опишите принципы обучения искусственных нейронных сетей.

## Глава 2. Жаропрочные никелевые сплавы как объект моделирования

---

**Ж**аропрочные никелевые сплавы (ЖНС) используются для получения деталей газотурбинных двигателей, имеющих широкое применение, как в авиации, так и в наземной технике. Изделия из этих сплавов работают при температурах до 1 200 °С и испытывают широкий комплекс воздействий: термического напряжения, агрессивных сред, контактные напряжения, растяжения от центробежных сил, вибрационные напряжения изгиба и кручения газового потока. При ресурсном проектировании и прочностных расчетах изделий необходимо использовать значения характеристик конструкционной прочности материала для температурно-временного диапазона, соответствующего условиям эксплуатации.

### 2.1. Состав жаропрочных никелевых сплавов

---

Литейные жаропрочные никелевые сплавы являются сложнолегированными системами, в их состав входят следующие элементы [14, с. 161–371; 15, с. 147–170]:

**Никель** является основой и формирует матрицу с ГЦК-решеткой, участвует в образовании упрочняющих интерметаллидных фаз  $\gamma'$  и  $\gamma''$ , а также упрочняющих карбидных фаз.

**Кобальт** (0,2...29,0 масс. %) входит в состав  $\gamma$ -матрицы, замещая никель, но основная доля его растворяется в  $\gamma'$ -фазе. Кобальт упрочняет твердый раствор, повышает пластичность и вязкость, улучшает литейные свойства, а также увеличивает жаропрочность сплавов и уменьшает склонность к коррозии. Высокое содержание кобальта характерно для сплавов, разработанных в США.

**Хром** (2,0...22,5 масс. %) — входит в состав матрицы, участвует в образовании упрочняющей карбидной фазы  $\text{MeC}$  и боридной  $\text{MeB}$  фазы. При легировании никеля хромом его длительная прочность возрастает на 25–30 % в результате увеличения сил межатомной связи. Хром, растворяясь в  $\gamma'$ -фазе, увеличивает длительную прочность при 700–750 °С, но снижает ее при очень высоких температурах из-за ускорения диффузионных процессов. Повышает жаростойкость. Существенное повышение содержания этого элемента приводит к снижению стабильности структуры и длительной прочности сплава в связи с выделением топологически плотно упакованных (ТПУ) фаз.

**Алюминий** (0,2...12,8 масс. %) существенно повышает жаропрочность, увеличивая количество основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы, объем которой возрастает от 5 до 42 % с увеличением доли алюминия от 0,5 до 4 %. Повышает сопротивление сплавов коррозии, увеличивает температуры ликвидуса и сольвуса.

**Титан** (0,2...5,1 масс. %) — один из основных  $\gamma'$ -образующих элементов, количество которого, с одной стороны, обеспечивает образование необходимого содержания упрочняющей  $\gamma'$ -фазы, а с другой, — ограничивает объем избыточной эвтектики  $\gamma + \gamma'$ . Является карбидообразователем, увеличивает жаростойкость, повышает температуры ликвидуса и сольвуса, стабилизирует структуру. Легирование титаном до 2,5–3 % способствует образованию интерметаллида  $\text{Ni}_3\text{Ti}$ , что вызывает повышение длительной прочности.

**Ниобий** (0,1...6,5 масс. %) образует с матрицей твердый раствор, участвует в образовании упрочняющих  $\gamma'$  и  $\gamma''$  интерметаллидных фаз и карбидов типа  $\text{MeC}$ , обеспечивает повышение термостабильности всей структуры.

**Тантал** (0,5...15,0 масс. %) распределяется одновременно между  $\gamma$ -матрицей и упрочняющей  $\gamma'$ -фазой, стабилизируя и упрочняя обе эти фазы. Участвует в образовании и термической стабилизации карбидных фаз. Эффективно замедляет диффузионные процессы. Повышает однородность сплава за счет снижения уровня дендритной ликвации. При содержании тантала больше 10,0 масс. % возрастает вероятность его выпадения из твердого раствора в виде интерметаллидов системы  $\text{Ni-Ta}$ . Недостаточное легирование сплава танталом способствует росту ползучести и снижает сопротивление развитию усталостных трещин, однако его избыток приводит к нежелательному увеличению удельного веса сплава и повышает температуру полного растворения

$\gamma'$ -фазы. При увеличении содержания тантала от (0 до 5 % масс.) наблюдается снижение температуры ликвидуса на 25 °С.

**Молибден** (0,4...10,0 масс. %) большей частью находится в  $\gamma$ -матрице, способствуя твердорастворному упрочнению, также участвует в образовании  $\gamma'$ -фазы, карбидов и боридов. Одновременно повышает и прочность сплава и его термостабильность. При высоком содержании молибдена возрастает склонность к внутреннему окислению, особенно при высоких температурах и длительных выдержках. Молибден обеспечивает повышение стабильности структуры материала в области температур выше 1 000 °С. Наиболее существенно его вклад проявляется в изменении параметра  $\gamma$ -твердого раствора и, как следствие, морфологии упрочняющей  $\gamma'$ -фазы, делая ее кубической, и тем самым он обеспечивает высокое сопротивление ползучести. Также повышает температуры солидуса и сольвуса. Несмотря на указанные достоинства в больших количествах молибден, как и вольфрам, приводит к повышению удельного веса сплава и в сочетании с высокими концентрациями хрома приводит к структурной нестабильности материала.

**Вольфрам** (0,2...18,6 масс. %) участвует как в твердорастворном упрочнении, так и в дисперсионном, образуя  $\gamma'$ -фазу и карбиды. Способствует повышению стабильности  $\gamma'$ -фазы, увеличивает сопротивление сплава высокотемпературной ползучести и резко замедляет диффузию в сплаве. Из негативного влияния следует выделить увеличение скорости роста усталостных трещин и повышение удельного веса сплава.

**Ванадий** (0,1...5,5 масс. %) способствует твердорастворному упрочнению, стабилизирует структуру сплава, распределяясь в  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фазах, повышает жаропрочность и является карбидообразователем.

**Гафний** (0,03...1,75 масс. %) повышает температуру выделения и улучшает морфологию карбидов МС. Увеличивает прочность и пластичность сплавов. Связываясь с серой, образует стойкие сульфиды, что актуально для судовых двигателей. Способствует выделению неравновесных эвтектических и перитектических фаз, что повышает опасность локального оплавления сплава в процессе термической обработки. Сокращает размерное соответствие матрицы и основной упрочняющей фазы, в результате которого  $\gamma'$ -фаза начинает приобретать сферическую форму, обладающую по сравнению с кубической меньшей упрочняющей эффективностью. Повышает температуры ликвидуса и сольвуса.

**Железо** (0,5...10,0 масс. %) входит в состав матрицы, образует упрочняющие интерметаллидные и карбидные фазы.

**Углерод** (0,001...0,55 масс. %) — основной карбидообразователь. Наличие карбидных образований полиэдрической формы обеспечивает дополнительное дисперсное упрочнение  $\gamma$ -матрицы. Также наличие включений карбидов в значительной степени тормозит диффузионные процессы по границам зерен. С появлением жаропрочных сплавов с более эффективной монокристаллической структурой необходимость в упрочнении границ зерен отпала. По этой причине для всех современных монокристаллических сплавов углерод является вредной примесью и его количество в них всячески минимизируется.

**Бор** (до 1,0 масс. %) участвует в образовании боридных фаз.

**Цирконий** (0,003...2,0 масс. %) обеспечивает литейные свойства и свариваемость, а также повышает прочность сплавов.

**Кремний** (0,04...1,0 масс. %) является вредной примесью, поэтому его содержание ограничено в сплавах с равноосной структурой до 0,25 %, с направленной и монокристаллической структурой — до 0,20 %. Основная доля кремния (около 60 %) находится в  $\gamma'$ -фазе, приблизительно 8–10 % кремния содержится в карбидах, а оставшаяся часть растворяется в  $\gamma$ -матрице сплава. Кремний увеличивает объемное содержание легкоплавких фаз, а также стимулирует образование топологически плотноупакованных фаз. С увеличением концентрации кремния в сплаве наблюдается снижение температур фазовых превращений, также отмечается резкое снижение пластичности и рост темпа коагуляции упрочняющей  $\gamma$ -фазы.

**Лантан** (0,01...0,1 масс. %) и иттрий (до 0,02 масс. %) имеют низкую электроотрицательность и высокое сродство к большинству примесных элементов, образуя с ними термодинамически устойчивые тугоплавкие соединения. С серой (до 0,015 масс. %) и кислородом эти редкоземельные металлы образуют соединения низкой плотности, что позволяет удалять эти примеси через шлак. Является поверхностно активным элементом и образует устойчивые зоны обогащения на межфазных границах  $\gamma/\gamma'$ , препятствует массообмену, замедляет диффузию и, как следствие, деградацию структуры сплава при высокотемпературной эксплуатации. Повышает жаростойкость сплавов.

**Рений** (0,5...10,0 масс. %) участвует в твердорастворном упрочнении, существенно снижает коэффициент диффузии легирующих элементов, замедляет укрупнение упрочняющих фаз. Введение рения

в состав в сочетании с вольфрамом («рениевый эффект») существенно повышает длительную прочность сплава. Повышает температуру солидус. Обеспечивает формирование более мелкодисперсных частиц  $\gamma'$ -фазы при ее образовании из  $\gamma$ -твердого раствора и замедляет ее последующее растворение при повышенных температурах. Склонен к ликвационной неоднородности в пределах дендритной ячейки, устранить которую, благодаря его малой диффузионной подвижности, очень сложно. Кроме того, среди прочих, этот элемент в наибольшей степени провоцирует в сплавах образование топологически плотноупакованных фаз. В сплавах с довольно высоким содержанием рения содержание хрома может быть снижено до 4,0 масс. %, так как рений относится к элементам, повышающим сопротивление сплава газовой коррозии.

**Рутений** (1,6...6,0 масс. %) способствует твердорастворному упрочнению, не входит в состав и препятствует образованию ТПУ-фаз. Улучшает высокотемпературную стабильность микроструктуры. Плотность рутения почти в два раза меньше рения, и он менее подвержен ликвации.

Главным недостатком легирования сплавов рением и рутением является высокая стоимость. Совокупное содержание этих элементов более чем два раза увеличивает стоимость сплавов.

Таким образом, все легирующие элементы жаропрочных никелевых сплавов в зависимости от степени их влияния можно условно разделить на несколько групп:

- элементы, упрочняющие твердый раствор на основе никеля: Co, Cr, Mo, W, V, Hf, Fe, Ta, Re, Ru;
- элементы, способствующие образованию основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы: Co, Cr, Al, Ti, Ta, Mo, V, W, Nb;
- элемент, способствующий образованию основной упрочняющей  $\gamma''$ -фазы — Nb;
- элементы, образующие фазы внедрения (карбиды и бориды) и упрочняющие границы зерен за счет образования сегрегаций по границам зерен: Cr, Ti, Hf, Fe, Ta, Nb, V, W, Mo;
- элементы, препятствующие коррозии: Cr, Hf, La, Al, Ti, Y, Co;
- элементы, повышающие температуру полного растворения  $\gamma'$ -фазы и температуру солидуса: Mo, Re, Al, Ti, Hf, Ta, W;
- элементы, повышающие стабильность структуры: W, Ti, Ta, Mo, Re, Ru.

## 2.2. Структура и способы упрочнения ЖНС

После литья и термомообработки, структура жаропрочных никелевых сплавов гетерофазна [14, с. 161–171; 15, с. 147–170]:

Твердый раствор на основе никеля ( $\gamma$ -фаза), представляющий собой непрерывную матрицу фазы с гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой, содержащей в качестве легирующих элементов значительные количества Co, Cr, Mo, W, Re, Ru.

Упрочняющая  $\gamma'$ -фаза, являющаяся соединением типа  $A_3B$ , где А — атомы Ni, Co или Fe, В — атомы Al, Ti, Nb или Ta и образующаяся на основе кубической фазы  $Ni_3Al$  (структурный тип  $Cu_3Au$ ), которая обеспечивает упрочнение в двухфазных сплавах  $\gamma + \gamma'$  до (1 000...1 200) °С.

Упрочняющая  $\gamma''$ -фаза, образующаяся в сплавах с отсутствием или низким содержанием Al и высокой концентрацией Nb и представляющая собой орторомбическую фазу  $Ni_3Nb$  (структурный тип  $Cu_3Ti$ ), переходящую при температурах свыше 700 °С в фазу с объемноцентрированной тетрагональной решеткой (структурный тип  $TiAl_3$ ).

Карбидные фазы образуются углеродом в количестве (0,02...0,50 масс. %) и тугоплавкими элементами Ti, Hf, Ta, первоначально в форме  $MeC$ , а затем, в результате карбидных реакций, преобразуются в карбиды  $Me_{23}C_6$ ,  $Me_6C$ , склонные к образованию скоплений по границам зерен, богатых хромом, молибденом и вольфрамом.

Боридные фазы образованы бором с хромом или молибденом и проявляются на границах зерен.

Твердорастворное упрочнение  $\gamma$ -матрицы легирующими элементами обусловлено разницей в атомных диаметрах и валентностях легирующего элемента замещения и никеля. Увеличение разности валентностей никеля и добавки снижает энергию дефектов упаковки Ni, что затрудняет движение дислокаций в никелевом твердом растворе. К дополнительному упрочнению матричной  $\gamma$ -фазы приводит легирование металлом с большим, чем у никеля, модулем упругости. Таким образом, упрочнение никелевого твердого раствора при легировании будет возрастать в ряду элементов Co, Fe, Cr, V, Al, Ti, Mo, W, Nb, Ta, Re [16, с. 25–55].

Уникальные свойства таких сплавов во многом обусловлены так называемым «рениевым эффектом» — особым влиянием рения на металлы VI группы периодической системы элементов, ведущим к од-



новременному повышению прочности, пластичности, свариваемости сплавов, снижению температуры перехода в хрупкое состояние и отсутствию охрупчивания после рекристаллизации. Механизм «рениевого эффекта» до сих пор достоверно не установлен. Одной из основных причин, вызывающих этот эффект, считается повышенная растворимость углерода в бинарных сплавах молибден- и вольфрам-рений. В таких системах образуется тройная карбидная фаза, обладающая высокой прочностью и пластичностью, в отличие от хрупких карбидов вольфрама и молибдена. Легирование рением также меняет структуру оксидных примесей за счет образования двойных оксидов  $W(Re)O_3$  и  $Mo(Re)O_3$ , характеризующихся сферической формой, вместо индивидуальных  $WO_3$  и  $MoO_3$ , располагающихся в виде пленок по границам зерен этих металлов. Установлено, что в результате легирования рением изменяется механизм деформирования сплавов. В сплавах на основе твердых растворов рения в молибдене или вольфраме с объемноцентрированной кристаллической (ОЦК) решеткой при деформации имеет место не только скольжение, как это свойственно металлам с такой решеткой, но и двойникование, что более характерно для металлов с гексагональной плотно упакованной (ГПУ) решеткой. Такой дополнительный механизм деформации приводит к повышению пластичности сплавов молибден-рений и вольфрам-рений.

С 60-х годов прошлого столетия основной тенденцией в разработке жаропрочных никелевых сплавов для литья турбинных лопаток стало повышение в матричном  $\gamma$ -растворе содержания упрочняющей  $\gamma'$ -фазы (до 60–70 %). В то же время разработчики сплавов стремились и к повышению температуры полного растворения  $\gamma'$ -фазы в  $\gamma$ -твердом растворе путем увеличения концентрации Al, снижения содержания Cr и Co, а также дополнительного легирования тугоплавкими переходными металлами (Mo, W, Nb, Ta, Hf). Для упрочнения границ зерен вводились микродобавки B, Zr, Y, La и Ce [16, с. 55–75].

Жаропрочность сплавов зависит не только от объемного содержания и дисперсности упрочняющей  $\gamma'$ -фазы, но также от периодов кристаллических решеток ( $a\gamma$ ) и ( $a\gamma'$ ) фаз и величины их размерного несоответствия («мисфит»). Причем ее оптимальное значение параметра-мисфита находятся на уровне  $\sim (0,15...0,35\%)$ . В этом случае упрочняющая  $\gamma'$ -фаза имеет четко выраженную кубическую форму



и обладает наибольшим упрочняющим действием. Если же значение параметра кристаллической решетки упрочняющей фазы будет больше указанной величины, или они будут равны, то  $\gamma'$ -фаза примет сферическую форму, а ее эффективность как упрочнителя будет ниже.

Карбиды в жаропрочных сплавах на никелевой основе распределяются преимущественно по периферии ветвей дендритов и границам зерен. Их роль в ЖНС неоднозначна. Карбиды, расположенные по границам зерен, оказывают положительное влияние на характеристики кратковременной и длительной прочности, затрудняя зернограницное проскальзывание. Роль карбидного упрочнения возрастает при повышенных температурах. Карбиды препятствуют рекристаллизации и диффузии по поверхностям раздела, способствуя увеличению температурной работоспособности сплавов. Выделения карбидов оказывают и косвенное влияние на упрочнение никелевых сплавов. Связывая значительное количество основных легирующих элементов (Ti, Ta, W и др.), карбиды обедняют ими  $\gamma$  и  $\gamma'$ -фазы, снижая тем самым эффективность твердорастворного и дисперсионного ( $\gamma'$ -фаза) механизмов упрочнения. В жаропрочных сплавах наблюдаются четыре типа карбидов. Их образование определяется составом сплава, температурой и временем. Карбиды MC, сформировавшиеся в процессе кристаллизации сплава, при длительном воздействии высокой температуры и напряжения могут претерпевать превращения в карбиды других типов в соответствии со следующими твердофазными реакциями:  $MC + \gamma \Rightarrow M_{23}C_6 + \gamma'$ ;  $MC + \gamma \Rightarrow M_6C + \gamma'$ . Карбиды  $M_{23}C_6$  стабильны до температур 900...1000 °C; при более высоких температурах устойчивыми являются двойные карбиды типа  $M_6C$ . Последние образуются в жаропрочных сплавах с высоким содержанием тугоплавких металлов и характеризуются широким интервалом составов в пределах  $M_3C - M_{13}C$ . Типичными составами двойных карбидов являются  $(Ni, Co)_3Mo_3C$  и  $(Ni, Co)_2W_4C$ . Образовавшиеся в твердой фазе карбидные выделения имеют пластинчатую морфологию и служат концентраторами напряжений, отрицательно влияя на вязкость разрушения [16, с. 75–107].

Таким образом, комплекс свойств изделий из жаропрочных сплавов на основе никеля формируется за счет твердорастворного упрочнения матрицей, а также интерметаллидного и карбидного упрочнения частицами вторых фаз.

## 2.3. Свойства никелевых сплавов

Наиболее важные рабочие свойства жаропрочных сплавов — это жаропрочность и термостабильность. Жаропрочность — способность конструкционных материалов работать под напряжением в условиях повышенных температур без заметной остаточной деформации и разрушения. Для количественной оценки жаропрочности проводятся механические испытания, основным из которых является испытание на длительную прочность при растяжении ( $\sigma$ , МПа) — наибольшее механическое напряжение, которое выдерживает материал без разрушения при заданной температуре после определенной выдержки. Термостабильность — способность материала сохранять исходную структуру и свойства без изменений под воздействием нагрузок при заданной температуре.

Из анализа литературных источников и производственных данных [14, с. 161–371; 15, с. 147–170] следует, что характерные разрушения деталей газотурбинных двигателей и установок возникают из-за недостаточной жаропрочности сплавов, кроме того, временной ресурс работы изделий полностью зависит от термостабильности структуры жаропрочных композиций, поэтому основными производственными требованиями к материалам сплавов на основе никеля являются их жаропрочность и термостабильность.

Испытания на длительную прочность производятся следующим образом: образец, соответствующий условиям испытаний, устанавливается в захватах испытательной машины, помещается в печь, нагревается до заданной температуры и выдерживается заданное время при этой температуре. Затем, не извлекая образец из нагревательного устройства, производится испытание на разрыв. Результатом испытаний является величина разрывного усилия, приводящего к разрушению образца, выраженная в МПа. Результат обозначается как  $\sigma'_t$ , где  $t$  — время изотермической выдержки в часах, а  $t$  — ее температура в °С. Обычно образцы жаропрочных никелевых сплавов испытываются после изотермических выдержек от 50 до 10 000 часов при постоянных температурах диапазона (500...1 200) °С. Условия испытаний задаются разработчиками, и одна из основных проблем заключается в том, что каждой марке сплава назначается далеко не весь набор возможных режимов изотермических выдержек. Как правило, одна марка

сплава разрабатывается для ограниченного числа деталей определенной серии газотурбинных двигателей или установок. Режимы испытаний как раз должны совпадать с условием работы этих механизмов. В этом случае возможность оценить сплав на применение к другим условиям работы отсутствует.

## **2.4. Методы литья сплавов**

Композиции сплавов предназначаются для определенного способа упрочнения и технологии производства изделий. Первоначально химические составы сплавов составлялись для изготовления готовой продукции методами пластической деформации. Затем для производства основной продукции стали применять литейные технологии, что внесло свои принципы легирования, и в результате были получены поликристаллические детали с лучшими характеристиками. Параллельно развивались технологии порошковой металлургии с предназначенными именно для этих технологий химическими составами, способами диспергирования, заполнения форм и спекания. Следующим этапом улучшения свойств была разработка химических составов для осуществления технологии направленной кристаллизации, в результате получались изделия с вытянутыми зернами (столбчатая структура) без поперечных границ. Для наиболее совершенной технологии направленной кристаллизации были разработаны специальные составы сплавов, обеспечивающие совместный рост полиметаллических кристаллов с нитевидными карбидными кристаллами, так называемая естественно композиционная структура. Наиболее совершенной стала композиция легирующих элементов для монокристаллического литья, исключая границы зерен в изделиях. Всего известно пять поколений сплавов для получения изделий с монокристаллической структурой. Каждая новая технология, кроме совершенствования структуры и свойств, несла значительное увеличение сложности и стоимости получения изделий. В итоге число предприятий, реализующих технологии направленной кристаллизации и монокристалльного литья, весьма ограничено. Следует также отметить, что в современном производстве используются все перечисленные технологии, каждая из которых применяется для произ-

водства специальных изделий, наиболее же сложные применяются для изготовления самой ответственной продукции [14, с. 161–371; 15, с. 147–170].

## 2.5. Разупрочнение никелевых сплавов

В период эксплуатации изделий под воздействием высоких температур и механических нагрузок происходит разупрочнение структуры. Карбиды, образовавшиеся в структуре в результате реакций и имеющих стехиометрию  $M_{23}C_6$  и  $M_6C$ , являются разупрочняющими фазами. Соединение  $M_6C$  имеет иглообразную морфологию, разрушающую частично когерентную связь  $\gamma-\gamma'$ . Глобулярные выделения  $M_{23}C_6$  являются местом зарождения различных топологически плотно упакованных фаз (ТПУ). В сплавах с неблагоприятным сочетанием легирующих элементов или из-за их ликвации могут образовываться ТПУ-фазы различного типа: ромбоэдрическая  $\mu$ -фаза, тетрагональная  $\mu$ -фаза и орторомбическая  $\pi$ -фаза. По своей природе ТПУ-фазы относятся к хрупким электронным соединениям переходных элементов. Они выделяются в форме пластин из  $\gamma$ -твердого раствора. Помимо кристаллической структуры, ТПУ-фазы различаются содержанием тугоплавких металлов и их соотношением. Точная идентификация этих фаз затруднена как из-за чрезвычайно малых размеров пластинчатых выделений, так и вследствие того, что в пределах одного и того же ТПУ-выделения может сосуществовать несколько фаз, например  $\sigma$ - и  $\pi$ -фазы. Кроме того, в сплавах с повышенным содержанием тугоплавких металлов могут выделяться  $\gamma$ -фазы на основе  $Mo$  или  $W$  с объемно-центрированной кубической решеткой, а также рениевая  $\delta$ -фаза с гексагональной плотноупакованной решеткой [16, с. 25–107].

Еще одной причиной снижения жаропрочности сплавов является его ликвационная неоднородность, связанная с сегрегацией тугоплавких элементов  $W$ ,  $Mo$ ,  $Re$  в осях дендритов, что создает локальные очаги, которые являются потенциальной причиной выделения избыточных фаз даже в сплавах сбалансированного (в среднем) химического состава. Ликвация элементов частично устраняется при помощи многоступенчатой термической обработки, включающей длительную го-

могенизацию при температурах до 1370 °С, а также при использовании высокоградиентной направленной кристаллизации.

Образование пор округлой, кубической или тетрагональной формы также способствует снижению жаропрочности. Известно, что их происхождение связано с явлениями микроусадки при кристаллизации (литейные поры), растворения неравновесной эвтектической ( $\gamma + \gamma'$ )-фазы в условиях гомогенизации сплава (поры гомогенизации), диффузии вакансий в процессе ползучести (деформационные поры). Считается, что все они вносят свой вклад в механизм разупрочнения сплавов. Появление ограненных деформационных пор объясняется нескомпенсированностью диффузионных потоков (эффект Киркидала). Стабилизации пор в структуре сплавов способствует наличие на их поверхности тугоплавких элементов W и Re. Для устранения пор обычно применяют горячее изостатическое прессование (ГИП), которое повышает длительную прочность сплавов.

## **Контрольные вопросы к главе 2**

1. Каковы назначение и состав ЖНС?
2. Каковы основные свойства ЖНС?
3. Укажите фазовый состав структуры ЖНС.
4. Какие типы упрочнения структуры ЖНС вы знаете?
5. Охарактеризуйте распределение легирующих элементов между структурными составляющими.
6. Каковы технологии литья изделий и типы литых структур ЖНС?
7. Какие вы знаете режимы термообработки изделий из ЖНС и цели этих режимов?

## **Глава 3. Жаропрочность и термостабильность сплавов на основе никеля и их моделирование посредством ИНС**

---

**Ж**аропрочность материала достигается за счет оптимизации химического состава и использования самой передовой технологии монокристаллического литья. Эти методы позволяют повысить температуру газов, поступающих в турбину, до 1580 °С, что увеличивает тягу двигателя на 15...20 % и свой срок службы в 1,5...2 раза [17, с. 9–101]. Однако стремление улучшить характеристики газовых турбин привело к значительному увеличению их стоимости, особенно за счет легирования дорогостоящими элементами, такими как рений и рутений.

В настоящее время разработано и испытано несколько сотен различных составов жаропрочных сплавов на основе никеля. Работы над созданием новых сплавов продолжаются постоянно, их цель — увеличение жаропрочности и термостабильности, сокращение плотности для снижения массы изделия, а также понижение стоимости сплавов.

Одной из основных проблем является недоступность информации о жаропрочности и термостабильности никелевых сплавов после всех возможных режимов предварительных изотермических выдержек. Причиной этому является то обстоятельство, что набор режимов выдержек широк, а конкретным сплавам назначается определенный набор. Из 55 возможных вариантов на практике назначаются 25, но максимальное количество испытаний на один состав сплава составляет не более 20. Определенный же интерес у разработчиков вызвала бы полная информация, соответствующая всем режимам испытаний. Она также была бы полезна при разработке новых сплавов.

Получение идеальной структуры позволяет достичь высокого уровня жаропрочности, после чего ее необходимо сохранить в течение мак-

симального периода эксплуатации. Термостабильность структуры в целом и отдельных структурных составляющих в частности определяет надежность и долговечность сплава. На структурную стабильность влияют как внутренние, так и внешние факторы. К внешним относятся механические и тепловые напряжения, а к внутренним — метастабильные фазы (пересыщенные твердые растворы), фазовые превращения с появлением новых фаз и т. д. В любом случае структурная стабильность зависит от темпа диффузионных процессов.

При проектировании сплавов разработчикам необходимо достижение компромисса: с одной стороны, требуемую жаропрочность создает расширенный комплекс легирования, с другой — большое количество легирующих элементов снижает структурную стабильность, повышает удельный вес изделий и сокращает их срок эксплуатации. Проектирование новых сплавов основывается на установлении взаимосвязи между различными величинами, например между прочностью связи и термодинамическими характеристиками: теплотой сублимации, теплотой и температурой плавления, упругими константами, среднеквадратичным смещением атомов и дебаевской температурой, для чего используются эмпирические и корреляционные методы. Также изучаются корреляции между прочностью связи и электронным строением. Существуют соотношения между энергией активации диффузии и такими термодинамическими характеристиками, как энергия образования, энергия перемещения, теплота сублимации, температура и теплота плавления [17, с. 55–299]. Данные о термодинамической стабильности фазы и влиянии на стабильность сплава легирующих элементов получаются при исследовании температурной зависимости растворимости фазы. Так, о термостабильности основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы и сплава в целом судят по температуре ее полного растворения ( $T_{п.р}$ ). На основании комплексного исследования влияния легирующих элементов на изменение температурного уровня и температурной зависимости  $T_{п.р}$  и применением теории планирования эксперимента получены аналитические зависимости, предсказывающие влияние любого элемента при различном соотношении других элементов в сплаве. Еще одним критерием оценки термостабильности  $\gamma'$ -фазы является потенциал межатомного взаимодействия, определяющий величину ее дальнего порядка. Установление связи этой характеристики с легированием имеет широкое практическое значение для повышения пластичности интерметаллидов [17].



Таким образом, получение требуемого комплекса свойств жаропрочных никелевых сплавов осуществляется поиском закономерностей и корреляций их зависимостями от химического состава. Композиция сплава создается с позиций обеспечения основных служебных свойств (жаропрочность, жаростойкость), сохранения этих свойств в течение срока эксплуатации изделий (термостабильность), а также обеспечения технологических свойств металла при реализации определенного способа получения изделий (равноосное литье, направленная кристаллизация, монокристалльное литье).

Для синтеза и оптимизации свойств жаропрочных никелевых сплавов и фазовой стабильности применяются современные информационные технологии, позволяющие существенно сократить время и дорогостоящие материалы. В настоящее время используется несколько различных методов: базовых диаграмм, *Phacomp*, *New Phacomp*, методология программного автоматизированного расчета термодинамических, структурных и прочностных параметров жаропрочных никелевых сплавов; компьютерный метод конструирования жаропрочных никелевых сплавов, Дельта-Е метод для оценки фазовой стабильности (метод регрессионных моделей). В основу этих расчетов заложена теория Л. Поллинга о резонансе химической связи [18, с. 156–172].

Эти методы хорошо себя зарекомендовали и имеют широкое применение, к сожалению, они не учитывают результаты многочисленных испытаний образцов сплавов с различными химическими составами, накопленные мировым опытом. Кроме того, в источниках научно-технической информации не удалось обнаружить данных, объединяющих сведения о химических составах жаропрочных никелевых сплавов и их основных свойствах.

На сегодняшний день не существует физической теории или модели, всесторонне охватывающей корреляцию между всеми комбинациями множеств «химический состав — микроструктура — свойства» для всех марок сплавов. Это несколько усложняет анализ и моделирование свойств сплавов. Однако эти вопросы могут быть решены с помощью методов статистического анализа и прогнозирования. Статистические модели используются в областях, где имеется большой объем данных и отсутствуют физические модели, описывающие процесс. При наличии статистически значимого количества информации о составах и условиях испытаний сплавов на никелевой осно-



ве их можно успешно моделировать современными статистическими методами.

Доступным и понятным вычислительным инструментом является метод искусственных нейронных сетей (ИНС), работа которого построена на поиске корреляций между известными входными и выходными параметрами [19, с. 156, 373]. ИНС является современным нелинейным статистическим методом и широко используется для решения задач с большим количеством данных (*Big Data*). ИНС моделирует связь между входными и выходными данными, используя определенные нелинейные зависимости. Так как ИНС является нелинейным статистическим методом, он может быть использован для решения трудно формализуемых задач.

Ранее такой метод уже применялся для анализа сплавов на основе никеля. Цели этих работ заключались в:

- синтезе новых химических составов жаропрочных сплавов;
- моделировании изменения коэффициента термического расширения;
- моделировании энергетического гистерезиса;
- предсказании энергии малоциклового усталости;
- моделировании развития усталостных трещин;
- прогнозировании возникновения дефектов материалов;
- моделировании времени до разрушения.

В основном все расчеты были посвящены какой-то одной марке сплава. Работ по расчету жаропрочности на основании установления корреляций между химическим составом сплава и экспериментально полученными значениями длительной прочности при растяжении для большого количества сплавов, а также анализу изменения жаропрочности и термостабильности широкой номенклатуры сплавов, не обнаружено.

Обобщение информации о химических составах сплавов на основе никеля, их жаропрочности и термостабильности позволяет составить базу данных, полезную для специалистов. Обработка полученной базы с применением современных информационных технологий расширит представления о комплексном влиянии легирующих элементов на основные служебные свойства. Кроме того, полученные результаты позволят более рационально подходить к выбору необходимого сплава среди существующих или составлению новых сплавов.

### 3.1. База данных сплавов, преобразования Ларсона — Миллера

В литературе приводится достаточное количество сведений о химических составах жаропрочных никелевых сплавов, условиях их производства, а также о результатах их испытаний на жаропрочность. По материалам указанных и иных открытых источников была подготовлена база данных, объединяющая плавочные составы жаропрочных никелевых сплавов и значения испытаний образцов этих сплавов на сопротивление разрыву после изотермических выдержек. Необходимо отметить определенные сложности, связанные с формированием базы данных сплавов, пригодной для выполнения функций обучающей, тестовой и валидационной выборки при обучении ИНС. Такими сложностями являются: различные наименования сплавов в разных источниках, различные варианты легирования одного и того же сплава, неполные и/или несовпадающие по разным источникам данные об испытаниях сплава, использование различных единиц измерения при характеристике свойств и т. п. Однако эти сложности удалось решить путем многократной перекрестной проверки данных по сплавам и удаления из базы данных тех сплавов, по которым имелись сомнительные по достоверности сведения о результатах испытаний и/или легировании.

Результаты измерений пределов прочности на разрыв образцов разных марок жаропрочных никелевых сплавов адекватно сравниваются, если испытания были проведены после одинаковых режимов изотермических выдержек. Температура и время выдержки каждый раз назначаются разработчиками и варьируются в широких пределах, что затрудняет сравнение результатов испытаний между разными сплавами. Согласно этой методике предел длительной прочности представляется как функция параметра  $\sigma_{\text{дп}}$ :

$$\sigma_{\text{дп}} = f\left(T\left(C + \lg \tau_p\right)\right), \quad (3.1)$$

где  $T$  — абсолютная температура, °K;  $C$  — константа материала;  $\tau_p$  — время до разрушения. Для жаропрочных никелевых сплавов  $C$  равно 20 и зависимость принимает вид (2).

В отечественной литературе значения предела прочности на разрыв приводятся с отдельным указанием температуры и времени пред-

варительной изотермической выдержки, в зарубежной литературе эти данные заменяются параметром Ларсона — Миллера. Для более корректного сравнения отечественных и зарубежных сплавов температурно-временные условия испытаний преобразованы параметрическим методом Ларсона — Миллера [20], применяемого к предсказанию длительной жаропрочности широкого круга материалов и наиболее часто используемого благодаря простоте формульного выражения:

$$P_{LM} = T(C + \lg \tau), \quad (3.2)$$

где  $T$  — абсолютная температура изотермической выдержки, К (иногда в литературе встречается в градусах Ранкина);  $\tau$  — время изотермической выдержки, ч;  $C$  — константа сплава, традиционно принимаемая равной 20, применяется для экстраполяции данных по длительной прочности, и ее величина зависит от ползучести металла и характера разрушения, для хрупкого разрушения  $C = 20$ , для вязкого разрушения может возрастать до 48 [20], т. о.

$$P_{LM} = T(20 + \lg \tau) / 1000. \quad (3.3)$$

Формирование базы данных выявило одну важную проблему: конкретному сплаву соответствует не весь возможный набор значений жаропрочности, определенных экспериментально. Следовательно, возникает сопутствующая задача: используя известные экспериментальные значения предела прочности на разрыв рассчитать (спрогнозировать) недостающие для каждого состава сплава значения.

### **3.2. Вычислительный эксперимент на основе ИНС**

---

Для достижения поставленных выше целей была подготовлена база данных о плавочных химических составах и жаропрочности 270 марок российских и зарубежных сплавов на основе никеля, где информация о химических составах и свойствах жаропрочных никелевых сплавов приведена в единый вид и размерность. Для исключения факторов, связанных с размером зерна и межзеренной границы, в расчет принимались данные сплавов только с монокристаллической структурой.

Приведем алгоритм вычислительного эксперимента.

1. Преобразование входных данных.
2. Выбор конфигурации и построение искусственной нейронной сети.
3. Выбор обучающего алгоритма и обучение (тренировка) сети.
4. Поиск закономерностей между входными параметрами.
5. Оценка полученных корреляций с использованием тестовой выборки
6. Расчет (прогнозирование, предсказание) неизвестных значений жаропрочности.

Ниже подробно рассмотрим каждый из этапов.

### **3.3. Преобразование входных данных**

---

План проведения вычислительного эксперимента условно разделяется на подготовительный и непосредственно экспериментальный этапы. Цель подготовительного этапа — определение условий, обеспечивающих наибольшую точность результатов эксперимента. Многочисленные попытки провести вычислительный эксперимент, используя входные данные в том виде, как они представлены в литературных источниках, не приводили к значимым результатам, и СКО не снижалось ниже 60 %, несмотря на увеличивающуюся выборку.

Входными параметрами задачи являются:

- химический состав сплава, где содержание легирующих элементов выражается весовыми процентами, т. е. концентрации 25 химических элементов: C, Cr, Co, Mo, W, Al, Ti, Nb, V, Fe, Y, Zr, Ta, Re, Ru, V, Ce, La, S, Si, Mn, Mg, P, Hf, Si;
- температура ( $K$ ) изотермической выдержки;
- время ( $ч$ ) изотермической выдержки;

С учетом всех возможных легирующих элементов общее число входных параметров составило 27. Выходным параметром задачи является величина предела прочности на разрыв  $\sigma_T^r$  (МПа), характеризующая жаропрочность сплавов.

Содержание легирующих элементов было нормализовано к концентрации никеля (десятичный формат со значениями от 0 до 1).

Температура и время изотермической выдержки были преобразованы в параметр Ларсона — Миллера (3.2) ( $\kappa K \equiv K \cdot 10^3$ ). Для получения значений того же размера, что и концентрация легирующих элементов,  $P_{LM}$  был преобразован путем деления на  $10^5$  (3.4):

$$P_{LM} = T \cdot (20 + \lg \tau) \cdot 10^{-5}. \quad (3.4)$$

Поскольку численные значения предела прочности на разрыв ( $\sigma$ , МПа) в испытаниях охватывает диапазон нескольких порядков (от единиц до тысяч МПа), было решено использовать логарифмическое преобразование (5), позволяющее делать ошибки прогнозирования относительными:

$$y = -\lg \sigma. \quad (3.5)$$

Для описания выходных параметров сети введем целевую функцию ( $y$ ), значения которой для обратного преобразования (3.5) исключают возможность получения отрицательного значения, поскольку они невозможны, что существенно повышает точность работы сети:

$$\sigma = 10^{-y}. \quad (3.6)$$

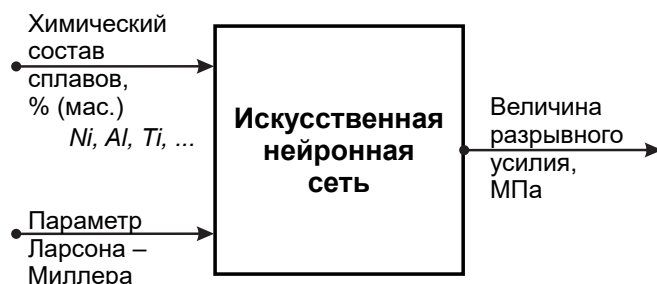
Знак «минус» в формуле (3.5) имеет целью встроить в процесс обучения сети априорную информацию [19]: поскольку ставится в задаче нахождение зависимости длительной прочности от параметра Ларсона — Миллера, каковая является убывающей, то и преобразование выходной величины описывается убывающей функцией.

С целью повышения точности расчетов для входных данных было применено квантильное разложение на группы, случайное деление каждой группы на обучающие (70 %) и тестовые (30 %) выборки, объединение обучающих и тестовых выборок из каждой группы в общие обучающие и тестовые наборы.

В результате предложенных преобразований все выходные параметры приобрели безразмерный характер и одинаковый масштаб шкалы [0; 1] и СКО уменьшилось до 5 % при выборке в 270 плавочных составов сплавов и их известных пределов прочности, соответствующие различным  $P_{LM}$ . Полученная точность вычислений соизмерима с экспериментальной погрешностью при определении предела прочности на разрыв.

### 3.4. Выбор конфигурации и построение искусственной нейронной сети в пакете MATLAB

На рисунке 3.1 приведена схематическая модель искусственной нейронной сети, подготовленная для расчета неизвестных значений жаропрочности сплавов на основе данных о химическом составе.

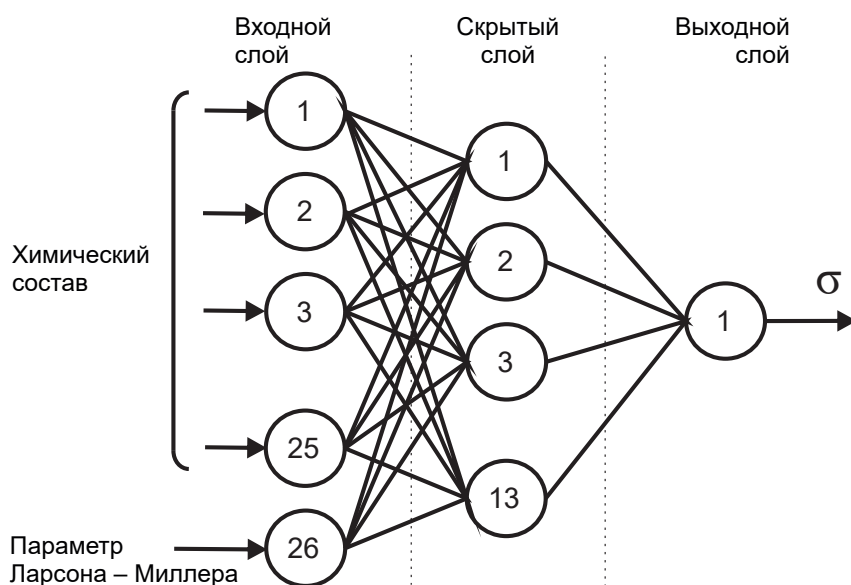


**Рис. 3.1.** Схематическая модель ИНС для расчета жаропрочности никелевых сплавов никеля по химическому составу и известным экспериментально определенным значениям предела прочности на разрыв

ИНС состоит из связанных между собой простых синхронных вычислительных элементов — нейронов, которые моделируют работу биологического нейрона. ИНС имеет входной слой нейронов, воспринимающий первичную информацию, промежуточные или «скрытые» вычислительные слои и выходной слой, в которых находятся нейроны, получающие информацию от предыдущих слоев, и выдающий результат моделирования. Количество нейронов во входном и выходном слое определяется количеством параметров, участвующих в расчете и моделируемом результате. Так же, как и биологические аналоги, искусственные нейроны получают сигналы друг от друга посредством связи, которые называются синапсами. Каждый синапс в искусственной нейронной сети, так же, как и сами нейроны, имеет вес, который определяет уровень передаваемого сигнала. Направление передачи сигнала зависит от выбранной модели ИНС. В модели ИНС прямого распространения (см. рис. 1.6, с. 17) сигналы передаются в одном направлении от входного слоя к выходному. Обучение искусственной нейронной сети состоит в том, чтобы посредством подачи на вход сети обучающего воздействия и, таким образом, изменения весов

и преобразования сигналов внутри сети определить закономерность между входными и выходными данными, выражающуюся в функциональной зависимости.

Выбор типа сети был сделан по аналогии с подходом [21]. Выбранная искусственная нейронная сеть с байесовской регуляризацией (BRANN) является более надежной, чем стандартные сети обратного распространения, и способна уменьшить или даже устранить необходимость перекрестной проверки. Таким образом, была выбрана ИНС прямого распространения с 27 нейронами на входном слое, 13 нейронами в скрытом слое и 1 нейроном на выходном слое (рис. 3.2).

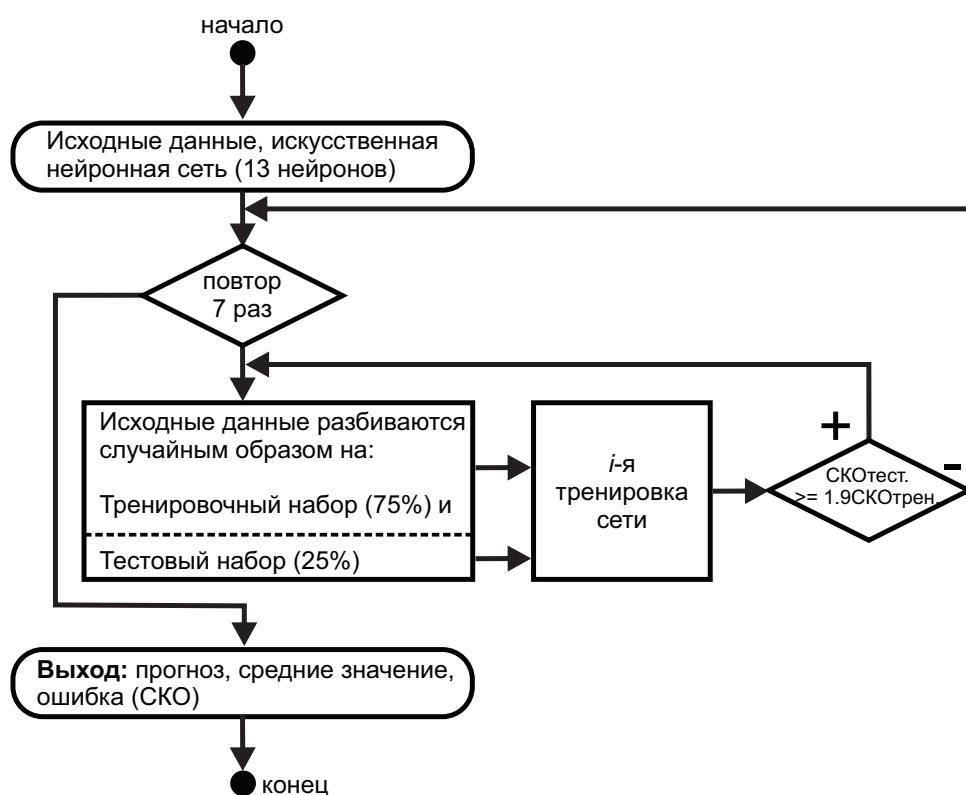


**Рис. 3.2.** Конфигурация искусственной нейронной сети

Число нейронов в скрытом слое подбиралось эмпирически по критерию уменьшения RMSE на полной выборке. Исходно число нейронов в скрытом слое было выбрано равным пяти и в каждом последующем вычислительном эксперименте увеличивалось на один. В рамках каждого вычислительного эксперимента одновременно создавалось пять идентичных сетей, которые независимо друг от друга тренировались на полной выборке. «Пять сетей» представляется разумным минимумом, поскольку каждый вычислительный эксперимент длится несколько часов.

### 3.5. Выбор обучающего алгоритма и обучение (тренировка) сети

Процедура обучения состоит из семи циклов, соответствующих семи независимым сетям, с определенным числом итераций (до 10), каждая итерация состоит из нескольких (до 10) эпох обучения. На каждой итерации набор данных делится случайным образом на тренировочную (75 %) и тестовую (25 %) подвыборки, участвующие в подготовке конкретной сети (рис. 3.3).



**Рис. 3.3.** Алгоритм обучения ИНС

Для окончания обучения был установлен критерий — величина среднеквадратичной ошибки MSE (3.7):

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (y_{predicted\_i} - y_{fact\_i})^2}{n}. \quad (3.7)$$



После каждой эпохи вычислялся MSE и сравнивался с критериальным значением. Процесс обучения оканчивался, когда текущее значение MSE становилось меньше критериального. В данном эксперименте величина  $MSE.test \geq 1,9 \cdot MSE.training$

Конечная производительность сети оценивается по среднеквадратической ошибке RRMSE (3.6), вычисленной по данным тренировочной выборки:

$$RRMSE = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^k \left( \frac{\sigma_{predicted\_j} - \sigma_{real\_j}}{\sigma_{real\_j}} \right)^2}{k}}. \quad (3.8)$$

По окончании обучения для каждой сети вычислялся RRMSE, среднее по пяти значениям и СКО. Дальнейшее увеличение числа нейронов было признано нецелесообразным, когда уменьшение среднего RRMSE по отношению к предыдущему этапу стало меньше величины СКО. В окончательном варианте сети в скрытом слое было 13 нейронов, что совпадает с результатом схожего исследования, полученным ранее [21].

Для борьбы с одной из основных проблем в обучении нейронных сетей — переобучением — был применен специализированный бутстрэп-алгоритм. Процесс обучения был разбит на итерации (до 500). Каждая итерация состоит из небольшого (до 30) количества эпох (в терминологии ИНС). На каждой итерации из общей выборки случайным образом извлекается без повторений 90 % образцов, которые и используются для обучения сети на этапе текущей итерации. Эти образцы разбиваются на собственно тренировочную (75 %) и внутреннюю тестовую группы (25 %). Критерием выхода из процесса обучения на этапе каждой итерации является достижение целевого значения RRMSE, выбираемого эмпирически чуть ниже уровня, где начинают расходиться RRMSE тренировочной и тестовой выборки, полученные после очередной эпохи обучения. По завершении процесса обучения на данной итерации образцы возвращаются в общую выборку.

Таким образом, сеть многократно «доучивается» на варьируемом наборе до тех пор, пока значение RRMSE, полученное на тестовой выборке, превышает значение RRMSE, полученное на тренировочной выборке, на величину более чем 20 %.

В результате оптимизации была получена ИНС с минимальной среднеквадратичной относительной ошибкой  $RRMSE = 16 \%$ , предна-

значенная для получения корреляций между входными и выходными параметрами. В данном случае — между химическими (плавочными) составами жаропрочных никелевых сплавов и их пределом прочности на разрыв после длительных изотермических выдержек. Сами корреляции представляют собой массив параметров (весов в терминологии ИНС) нейронной сети, отражающих влияние химического состава сплава на основе никеля на изменение зависимости  $\sigma = f(P_{LM})$ .

### **3.6. Валидация и верификация полученной корреляционной модели с использованием тестовой выборки**

Для исключения фактора переобучения созданной ИНС было решено выделить валидационную группу. Исходные данные были упорядочены по возрастанию параметра Ларсона — Миллера. Затем, для формирования валидационной группы, случайным образом выделялись 10 % сплавов. Валидационная группа не участвовала в обучении или тестировании созданной ИНС.

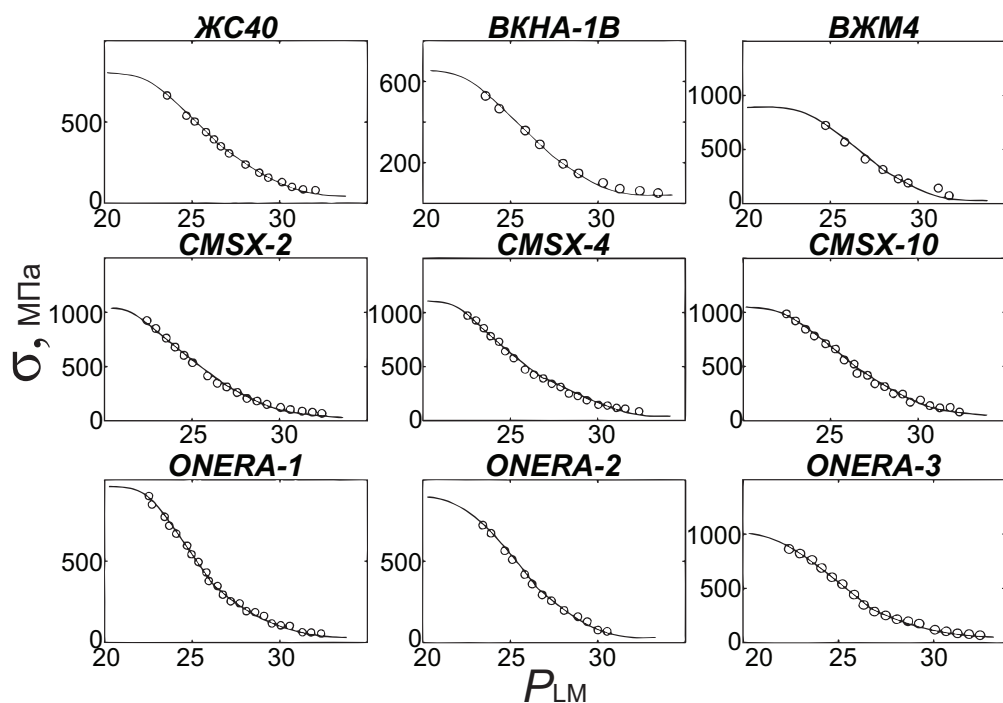
Таким образом, обучение ИНС проходило в несколько этапов:

- 1) формирование валидационной группы;
- 2) обучение ИНС на оставшихся данных с целевой среднеквадратичной ошибкой, равной 0,0009, и разделением данных на обучающую (75 %) и тестовую выборки (25 %);
- 3) загрузка входных данных из валидационной группы в обученную нейронную сеть и получение расчета по ним;
- 4) сверка рассчитанных посредством ИНС данных с фактическими данными.

Кроме того, до начала режима тренировок сети из общей базы сплавов была выделена верификационная группа из 9 сплавов, которые в дальнейшем не участвовали в вычислительных экспериментах и использовались исключительно для финальной оценки точности прогноза. Верификационная группа формировалась следующим образом. Собранная база данных жаропрочных никелевых сплавов содержала около 50 вариантов различных изотермических выдержек. Как уже было замечено, для каждой марки сплава имелись далеко не все значения разрывных усилий. В верификационную группу случайным

образом отбирались только те сплавы, для которых имелась информация не менее чем о 20 вариантах испытаний, т. е. наиболее представительные с точки зрения имеющейся о них информации.

После завершения создания и обучения сети в подготовленную и обученную конфигурацию были загружены химические составы сплавов из верификационной группы и произведено прогнозирование их жаропрочности. В результате этого была получена серия графиков зависимостей жаропрочности от параметра Ларсона — Миллера, соответствующих всем составам сплавов, образующих верификационную группу (рис. 3.4).

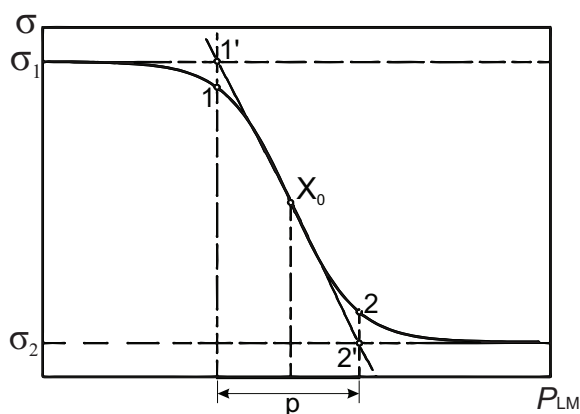


**Рис. 3.4.** Зависимости предела прочности на разрыв верификационной группы жаропрочных никелевых сплавов от параметра Ларсона — Миллера: сплошной линией показаны спрогнозированные значения; окружностями обозначены значения жаропрочности, полученные экспериментальным путем

Зависимость  $\sigma = f(P_{LM})$  имеет одинаковый *s*-образный вид для всех сплавов из этой группы. Сравнение результатов демонстрирует удовлетворительную сходимость предсказанных и реальных значений, полученных для контрольной группы.

### 3.7. Расчет неизвестных значений жаропрочности. Зависимость разрывного усилия от условий испытания

Проведенные расчеты позволили дополнить недостающие значения жаропрочности, соответствующие всем возможным условиям испытаний ( $P_{LM}$ ) для всех плавочных составов исследуемых жаропрочных никелевых сплавов. После этого были реконструированы зависимости длительной прочности от параметра Ларсона — Миллера для всех монокристаллических никелевых композиций, содержащихся в базе. Вид зависимости, характерный для всех сплавов, приведен на рис. 3.5, он несколько отличается от традиционного представления этих зависимостей. В большинстве литературных источников результаты представлены в виде линейной зависимости, по нашему мнению, из всей кривой выделен только один участок, обозначенный в данном случае как 1 и 2 на кривой.



**Рис. 3.5.** Зависимость предела прочности на разрыв от параметра Ларсона — Миллера, характерная для всех изученных сплавов на основе никеля

Таким образом, предел прочности на разрыв, характеризующий жаропрочность сплава, немонотонно уменьшается с увеличением параметра Ларсона — Миллера. На кривой условно выделяется три участка, характеризующихся различной скоростью разрушения, их границы обозначены точками 1 и 2. Между этими точками заключен участок с максимальной скоростью понижения предела прочности на разрыв.

Середина этого участка обозначена как  $X_0$ , через которую проведена касательная линия. Угол наклона касательной отражает термостабильность сплава. Максимальное и минимальное значения предела прочности на разрыв обозначены как  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ , соответственно

Коэффициент  $p$  характеризует, насколько близка экспоненциальная кривая к оси абсцисс, т. е.  $p$  — это косвенный показатель термической стабильности структуры сплава. Чем больше величина  $p$ , тем дольше структура сопротивляется разрушению.

Поскольку структура жаропрочных никелевых сплавов гетерофазна, процесс ее деградации является многоступенчатым из-за различной температурной стабильности структурных составляющих, что влияет на интенсивность понижения предела прочности на разрыв.

Анализ литературных данных и наши исследования [22–24] позволяют сформировать наиболее общую картину структурных изменений, происходящих в образцах в условиях, имитирующих условия эксплуатации. В  $\gamma$ -твердом растворе под воздействием температуры и приложенной нагрузки в определенном направлении, образуется так называемая рафт-структура и возникают дислокации. Выделения основной упрочняющей  $\gamma'$ -вторичной фазы кубоидной морфологии коагулируют, отдельные частицы срастаются между собой, происходит рост блоков. Значительно снижается и совсем исчезает когерентность между матрицей и основной упрочняющей интерметаллидной  $\gamma'$ -вторичной фазой. При выдержках свыше 1 100 °С количество  $\gamma'$  фазы заметно снижается. Выделения карбоборидных и карбонитридных эвтектик уменьшаются в размерах и замещаются колониями округлых, более дисперсных частиц. Карбиды эвтектического происхождения типа МС шрифтовой морфологии распадаются на колонии округлых частиц и также растворяются в матрице. Глобулярные карбиды МС более стабильны, но с увеличением наработки по их границам протекают карбидные реакции, результатом которых являются два новых карбида  $M_6C$  и  $M_{23}C_6$ , относящихся к топологически плотно упакованным фазам (ТПУ). Карбид  $M_6C$  иглообразной морфологии как разрушает основную упрочняющую интерметаллидную фазу, так и разрезает ее когерентную связь с матрицей. Другой карбид  $M_{23}C_6$  также не отличается стабильностью и является основой для возникновения ТПУ фаз, таких как ромбоэдрическая  $\mu$ -фаза, тетрагональная  $\sigma$ -фаза, орторомбоэдрическая Р-фаза и фаза Лавеса. Следует заметить, что углерода в монокристаллических сплавах практически нет, либо он

присутствует в очень малых количествах. В этом случае проблем, вызываемых карбидными реакциями, не бывает. Перечисленные структурные изменения приводят к многостадийному разупрочнению исходной структуры, что отражено ходом кривой на рис. 3.6–3.7.

Для большинства сплавов зависимость  $\sigma = f(P_{LM})$  демонстрирует заметную нелинейность и асимптотическую тенденцию  $\sigma$  к нулю при значениях  $P_{LM}$  правее точки 2. С другой стороны, при относительно низких температурах и коротких изотермических выдержках (значения  $P_{LM}$  левее точки 1) жаропрочность мало зависит от параметра Ларсона — Миллера и остается почти постоянной до определенного критического значения  $P_{LM}$ . В диапазоне значений  $P_{LM}$  от точки 1 до точки 2 все сплавы имеют практически линейное уменьшение жаропрочности.

Параметрический метод Ларсона — Миллера опирается на уравнение Аррениуса:

$$\dot{\varepsilon} = A \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right), \quad (3.9)$$

где  $A$  — искомая константа, предэкспоненциальный множитель;  $Q$  — энергия активации механизмов дефектообразования;  $k$  — постоянная Больцмана;  $kT$  — термодинамический потенциал;  $\dot{\varepsilon} \equiv \frac{d\varepsilon}{dt}$  — динамика деформации.

Логарифмируя выражение (3.9), получаем:

$$\ln A - \ln \dot{\varepsilon} = \frac{Q}{kT}. \quad (3.10)$$

Далее вводим некоторые ограничения.

1. Деформация ползучести до разрушения  $\varepsilon_r$  является постоянной величиной в некотором интересующем температурном диапазоне.
2. Деформация находится в установившемся режиме ползучести. В этих предположениях динамика (скорость) деформации может быть выражена через время до разрушения:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_r}{t_r}. \quad (3.11)$$

Тогда выражение (3.10) может быть записано в виде:

$$\ln A - \ln \dot{\varepsilon} = \ln A - \ln \varepsilon_r + \ln t_r = \frac{Q}{kT}. \quad (3.12)$$

Объединяя постоянные величины

$$\ln A - \ln \varepsilon_r = C \quad (3.13)$$

и переходя от натурального логарифма к десятичному, получаем:

$$C + \log t = \frac{Q}{kT} \Rightarrow T(C + \log t) = \frac{Q}{k} \equiv P_{LM}. \quad (3.14)$$

Введенный подобным образом параметр функционально связан с приложенным напряжением  $\sigma$  через диаграмму растяжения.

В оригинальной работе Ларсона и Миллера [20] на основании обобщения экспериментальных результатов показано, что в координатах  $\log \sigma - P_{LM}$  зависимости представляют собой прямые линии в некотором интервале значений параметра Ларсона — Миллера. Это означает, что ограничение (3.11) верно для широкого круга металлических материалов.

Однако, в большинстве литературных источников на диаграммах  $\log \sigma - P_{LM}$  или  $\log \sigma - \log t$  указываются области излома прямых линий. Наличие излома объясняется изменением механизма дефектообразования с повышением температуры.

В случае исследования разрывных усилий обычно следуют подходу Нортон — Бэйли, используя показательное уравнение Аррениуса в виде:

$$\left( \frac{d\varepsilon}{dt} \right)_{\min} = A \sigma^n \exp \left( -\frac{Q}{kT} \right). \quad (3.15)$$

И в этом случае ход зависимостей  $\log \sigma = f(P_{LM})$  и  $\log \sigma = f(\log t)$  также получается в виде прямой линии, поскольку при логарифмировании показатель  $n$  в выражении 15 даст постоянный множитель.

Далее подход Нортон — Бэйли был расширен на все области диаграммы растяжений и позволил уточнить наличие изломов на диаграммах и учесть различия динамики дефектов структуры в различных температурно-временных режимах.

Результаты исследований свидетельствуют, что структурные изменения в период длительных изотермических выдержек не идут последовательно и не имеют четко выраженных температурно-временных границ. В связи с этим наилучшим отображением этих процессов является гладкая сигмоидальная функция [25, 26], аналитическое выражение которой записывается как (3.16).

Таким образом, зависимость  $\sigma = f(P_{LM})$  может быть наиболее оптимально описана аналитической функцией (3.16), являющейся следствием уравнения Аррениуса, для удобства  $x \equiv P_{LM}$ :



$$\sigma(x) = \sigma_2 + \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{1 + \exp\left(\frac{x - x_0}{p}\right)}, \quad (3.16)$$

где  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $x_0$  и  $p$  — параметры, устанавливаемые в ходе аппроксимации зависимости  $\sigma = f(P_{LM})$  для конкретного состава сплава. Величина  $\sigma_1$  определяет неизменность  $\sigma$  при  $P_{LM}$  до точки 1,  $\sigma_2$  характеризует асимптотическую склонность  $\sigma$  к нулю,  $x_0$  является точкой перегиба, геометрически соответствующей середине диапазона линейного уменьшения  $\sigma$ . Наибольшее физическое значение модели (3.16) имеет коэффициент наклона  $p$ , отражающий термическую стабильность структуры жаропрочного сплава. Чем больше значение  $p$ , тем медленнее идет процесс деградации структуры, т. е. выше термостабильность. Следует отметить, что выявленная сигмоидальная функция обобщает как линейные, так и экспоненциальные подходы, традиционно используемые для описания зависимости  $\sigma = f(P_{LM})$ . При этом внимание исследователей в основном уделяется условно линейному участку (1–2), соответствующему области наиболее интенсивной деградации структуры и, следовательно, понижения прочностных свойств.

Обычно термостабильность сплава оценивается по температуре полного растворения основной упрочняющей  $\gamma'$ -вторичной фазы ( $t_{п.р.}$ ) [17]. В данном случае предлагается способ оценки этого параметра аппроксимацией зависимости  $\sigma = f(P_{LM})$ .

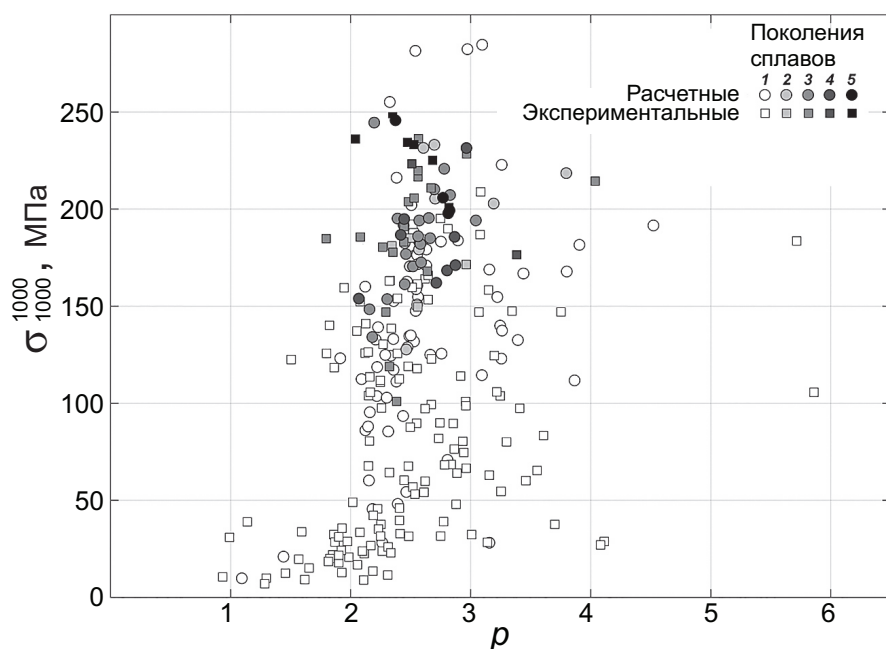
Несмотря на то, что зависимость  $\sigma = f(P_{LM})$  для всех сплавов имеет одинаковый вид, ее параметры  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $x_0$  и  $p$  зависят от химического состава сплава и, соответственно, структурных изменений, происходящих в сплавах в период длительных изотермических выдержек, предшествующих испытаниям на разрыв.

### 3.8. Диаграмма распределения сплавов по их жаропрочности и термостабильности

В отечественной литературе наиболее часто жаропрочные никелевые сплавы сравниваются между собой по величине разрывного усилия, определенного после выдержки образцов при 1000 °С в течение 1 000 часов. Это условие ( $\sigma_{1000}^{1000}$ ) соответствует параметру Ларсона — Мил-



лера  $x = 29,3$ . Для исследуемых сплавов часть таких данных была известна по материалам литературных источников, для остальных сплавов она была вычислена (предсказана, спрогнозирована) при помощи метода ИНС. Кроме того, используя предлагаемую методику, были рассчитаны параметры термостабильности для каждого состава сплава [25, 26]. Для сравнения сплавов между собой предлагается диаграмма распределения никелевых сплавов по их жаропрочности ( $\sigma_{1000}^{1000}$ ) и термостабильности ( $p$ ), рис. 3.6.



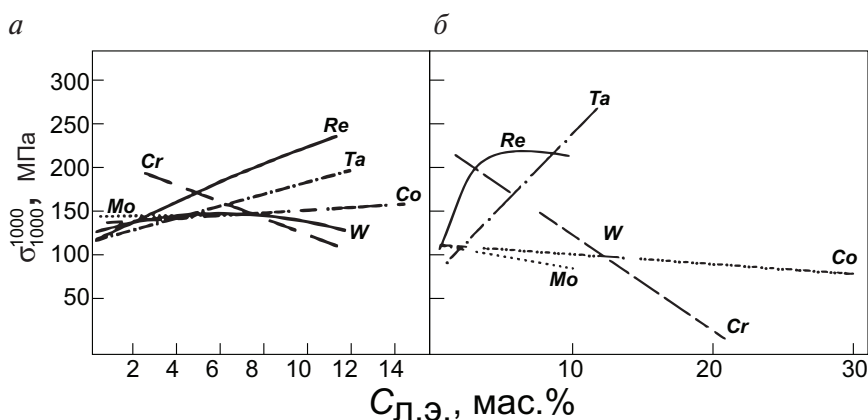
**Рис. 3.6.** Распределение 270 образцов жаропрочных никелевых сплавов по значениям их предела прочности на разрыв  $\sigma_{1000}^{1000}$  (параметр Ларсона — Миллера  $x = 29,3$ ) и параметру термостабильности  $p$

История разработки химических составов жаропрочных никелевых сплавов насчитывает пять поколений, условно различающихся содержанием двух легирующих элементов: рения и рутения [17]. Увеличение содержания рения в сочетании с вольфрамом существенно упрочняет сплав (т. н. рениевый эффект), но приводит к возникновению ТПУ фаз. Для снижения риска возникновения этих фаз химический состав дополняется рутением, препятствующим образованию охрупчивающих структурных составляющих и повышающим высоко-

температурную стабильность структуры сплава. Вместе эти два легирующих элемента составляют до 80 % себестоимости сплавов при совокупном содержании не более 14 %.

Также диаграмма свидетельствует о том, что жаропрочные никелевые сплавы при одинаковой жаропрочности существенно различаются в значениях параметра термостабильности.

Диаграмма на рис. 3.6 отлично демонстрирует рениевый эффект — значения жаропрочности увеличиваются в зависимости от поколений. Однако среди достижений сплавов 2–5 поколений встречаются расчетные и экспериментальные результаты сплавов первого поколения. Следовательно, эти сплавы обладают аналогичными эксплуатационными характеристиками, сопоставимыми со сплавами последних поколений, однако имеют значительно меньшую стоимость из-за отсутствия таких дорогостоящих легирующих добавок. Это объясняется лучшей скомпенсированностью химического, а следовательно и фазового состава. Рассмотрим, какими изменениями легирующих элементов сопровождается повышение жаропрочности. В литературе приведена информация о повышении жаропрочности с изменением содержания молибдена, хрома, рения, тантала, кобальта и вольфрама (масс. %), рис. 3.7, *а*. С помощью метода машинного обучения была получена аналогичная информация, рис. 3.7, *б*.

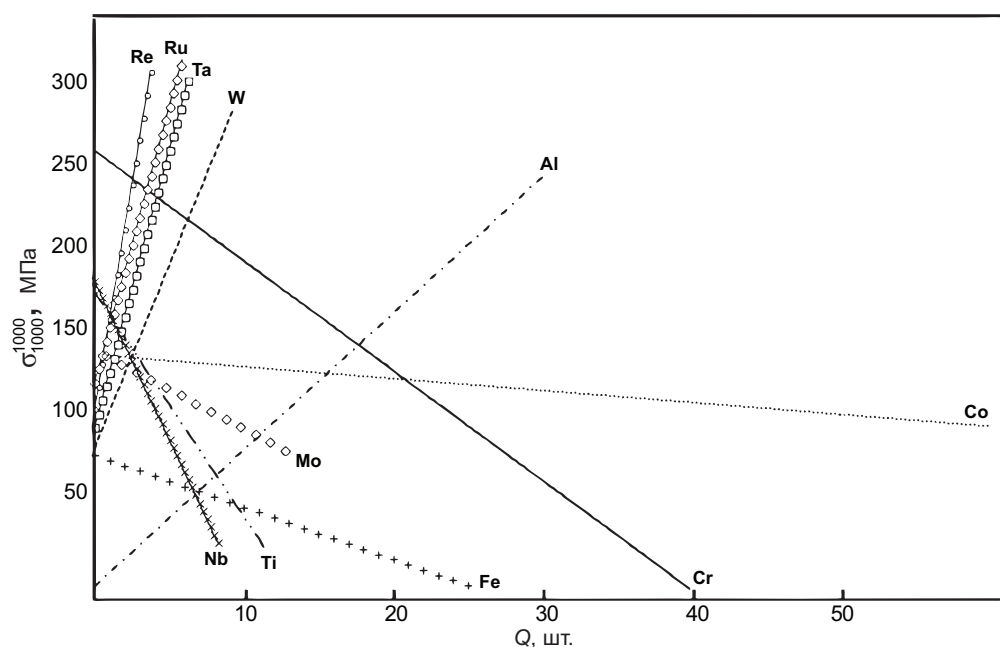


**Рис. 3.7.** Изменение содержания некоторых легирующих элементов, сопровождающееся повышением величины разрывного усилия  $\sigma_{1000}^{1000}$  (параметр Ларсона — Миллера  $x = 29,3$ ):

*а* — по [17]; *б* — метод ИНС

Как видно из рис. 3.7, разницу составило лишь изменение содержания хрома. Авторы [17] отмечают увеличение жаропрочности при повышении содержания кобальта, результаты вычислительного эксперимента свидетельствуют об обратном. Кроме того, нелинейной зависимостью отличаются изменения содержания вольфрама и рения.

Для упрощения анализа изменения концентраций легирующих элементов, сопровождающего увеличение жаропрочности, содержание легирующих элементов было выражено в атомных процентах и нормировано на содержание никеля для каждого состава (рис. 3.8). Таким образом, по оси абсцисс отложена величина, отражающая количество атомов легирующего элемента, приходящаяся на 100 атомов никеля.



**Рис. 3.8.** Изменение жаропрочности от содержания легирующих элементов, выраженное в атомных процентах и нормированное на содержание никеля

Приведенные линии трендов демонстрируют общую картину повышения жаропрочности, сопровождающуюся одновременным увеличением содержания рения, рутения, тантала, вольфрама и алюминия с понижением содержания кобальта, хрома, железа, молибдена, титана и ниобия. Очевидно, что отношение количества атомов этих

групп элементов является фактором скомпенсированности химического состава сплава  $K$ :

$$K = \frac{\sum_i C_{ami}}{\sum_j C_{amj}},$$

где  $I = W, Al, Ta, Re, Ru$ ;  $J = Cr, Co, Ti, Fe, Mo, Nb$ .

Диаграмма (рис. 3.9) свидетельствует, что уровень жаропрочности никелевых сплавов первого поколения достигнут за счет изменения соотношения концентраций основных легирующих элементов  $W, Al, Ta, Cr, Co, Ti, Fe, Mo, Nb$ , что привело к максимальному выделению более термостабильных упрочняющих фаз благоприятной морфологии (эффект Кишкина).

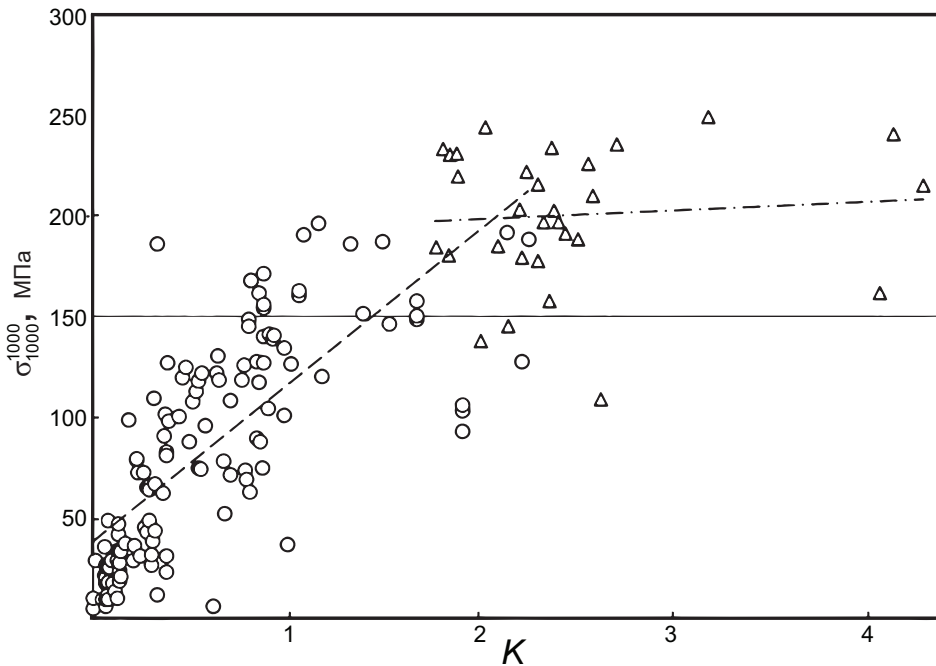


Рис. 3.9. Диаграмма зависимости жаропрочности от фактора скомпенсированности химических составов жаропрочных никелевых сплавов:

окружностями обозначены жаропрочные сплавы первого поколения, треугольниками — сплавы 2–5 поколений; пунктиром — линия тренда сплавов первого поколения, штрих-пунктиром — линия тренда сплавов 2–5 поколений

Рениевый эффект способствовал дальнейшему повышению жаропрочности в сплавах 2–5 поколений. Однако некоторые отлично сбалансированные сплавы первого поколения ничуть не уступают Re- и Ru-содержащим композициям по жаропрочности.

### **Контрольные вопросы к главе 3**

---

1. Перечислите основные испытания на жаропрочность.
2. Охарактеризуйте фазовую/структурную стабильность ЖНС.
3. Каковы причины и механизмы разупрочнения ЖНС?
4. Каково влияние углерода на структурные изменения?
5. Каковы вид и назначение преобразования Ларсона — Миллера?

## Заключение

---

Обилие разнообразных типов искусственных нейронных сетей и алгоритмов их обучения представляет определенные трудности при выборе конкретного метода для той или иной научно-технической задачи, особенно для неискушенного исследователя, однако мы бы рекомендовали начинать знакомство с ИНС именно с самых простых и очевидных сетей прямого распространения, а именно многослойного перцептрона. На наш взгляд, именно этот тип сети наиболее легко адаптируется для задач интерполяции, экстраполяции, построения регрессий и т. п., т. е. тех работ, которые наиболее часто возникают в научно-технической деятельности. Для задач, связанных с прогнозированием временных рядов и иных объектов, характеризующихся наличием влияния предыдущих значений на последующие, более подойдут ИНС с обратной связью. Распознавание образов, звуков, речи, многомерные регрессии и прочие похожие задачи обычно требуют более специализированных искусственных нейронных сетей, которые могут сочетать в себе признаки разных типов.

В любом случае с ростом вычислительных мощностей все больше практических и в основном плохо формализуемых задач будет решаться различными видами искусственных нейронных сетей.

В задачах моделирования свойств материалов на основе химического состава,  $\alpha$  фактически являются интерполяционными задачами, мы также считаем наиболее обоснованным применение многослойных сетей прямого распространения.

Основными инструментами расчетов нами были выбраны методы статистического анализа и машинного обучения, позволяющие на основании полученной базы с неполными данными рассчитать (спрогнозировать, предсказать) недостающие значения. Вычислительная методика основывается на определении корреляций между плавочными составами никелевых сплавов и их экспериментально определенными

свойствами. Для моделирования изменения свойств сплавов на основе никеля применен комплекс из семи одновременно действующих байесовских искусственных нейронных сетей, каждая сеть в котором образована 24 входными нейронами (содержание 23 легирующих элементов и параметры испытаний), 13 скрытыми нейронами и 1 выходным нейроном (отрицательный логарифм предела прочности на разрыв). В итоге была выбрана ИНС прямого распространения с 27 нейронами на входном слое, 13 нейронами в скрытом слое и 1 нейроном на выходном слое. На начальном этапе расчетов ошибка составляла 60 %. Для повышения точности расчетов была необходима специализированная подготовка данных.

С целью повышения точности расчетов была разработана методика подготовки данных. Содержание легирующих элементов было нормализовано к концентрации никеля. Режимы изотермических выдержек аппроксимированы с использованием комплексного параметра Ларсона — Миллера ( $P_{LM}$ ). Для получения значений того же размера, что и концентрация легирующих элементов,  $P_{LM}$  был преобразован путем деления на  $10^5$  и прологорифмирован для перевода ошибок прогнозирования в относительные. При обучении сети для входных данных было применено квантильное разложение на группы, случайное деление каждой группы на обучающие (70 %) и тестовые (30 %) выборки, объединение обучающих и тестовых выборок из каждой группы в общие обучающие и тестовые наборы. Предложенные меры позволили снизить ошибку расчетов до 5 %, соизмеримую с точностью экспериментального определения предела прочности на разрыв, что свидетельствует об адекватности выбранной модели.

Для верификации выбранной модели была отобрана информация о некоторых жаропрочных никелевых сплавах с максимальным количеством известных данных. Эти данные не участвовали в обучении нейронной сети. После подготовки и обучения ИНС был произведен расчет жаропрочности этой группы сплавов по плавочным химическим составам и произведено сравнение полученных результатов с заранее известными экспериментальными. В результате получена удовлетворительная сходимость данных, что также подтверждает адекватность примененной модели.

Предложенным методом машинного обучения на основании имеющихся экспериментальных данных были получены недостающие значения по всем видам испытаний в диапазоне изменения параметра

тра Ларсона — Миллера от 22 до 35 ( $\times 10^3$  K). В результате база данных была заполнена и для каждого плавочного состава сплава были получены зависимости  $\sigma = f(P_{LM})$ . Полученные зависимости являются справочными данными, интересующими как разработчиков жаропрочных никелевых сплавов, так и конструкторов техники, в которой используются эти материалы.

Каждая полученная зависимость  $\sigma = f(P_{LM})$  имеет S-образный вид, характерный для большинства жаропрочных сплавов на основе никеля. Такое изменение предела прочности на разрыв объясняется процессами разупрочнения структуры, хорошо описанными во многих литературных источниках. Участки изменения интенсивности происходящих в структуре сплава превращений отмечены как 1 и 2. Координаты этих границ структурных изменений индивидуальны для каждого состава сплава. Особый интерес представляет участок наиболее интенсивных изменений, заключенный между точками 1 и 2. Углом наклона этого участка предлагается определять термостабильности сплава  $p$ . Ранее термостабильность сплава характеризовалась только по температуре полного растворения основной упрочняющей  $\gamma'$ -вторичной фазы.

Для описания зависимости  $\sigma = f(P_{LM})$  предложено аналитическое выражение

$$\sigma(x) = \sigma_2 + \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{1 + \exp\left(\frac{x - x_0}{p}\right)},$$

где  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $x_0$  и  $p$  — параметры, устанавливаемые в ходе аппроксимации зависимости  $\sigma = f(P_{LM})$  для конкретного состава сплава. Данная аналитическая функция может применяться для расчетов жаропрочности и термостабильности без применения метода ИНС.

Сравнение жаропрочности и термостабильности сплавов на никелевой основе по диаграммам в координатах  $\sigma_{1000}^{1000} - p$  и  $\sigma_{1000}^{1000} - K$  позволило ранжировать сплавы по увеличению их основных свойств. Выявлено, что сплавы при одинаковой жаропрочности могут иметь разную термостабильность; жаропрочность и термостабильность не связаны между собой; существуют сплавы первого поколения со сбалансированным химическим составом по свойствам, не отличающимся от сплавов 2—5 поколений. Этот факт открывает новые перспективы использования экономолегированных сплавов первого поколения.



## Список библиографических ссылок

---

1. Шиффман Х. Р. Ощущение и восприятие. 5-е изд. СПб. : Питер, 2003. 928 с.
2. Dember W. N., Jenkins J. J., Teyler T. J. General Psychology. Hillsdale, NJ : Lawrence Erlbaum Associates, 1984. 915 p.
3. McCulloch W. S., Pitts W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity // Bulletin of Mathematical Biophysics. 1943. Vol. 5. P. 115–133.
4. Rosenblatt F. The Perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain // Psychological Review. 1958. Vol. 65. P. 386–408.
5. Touretzky D. S., Pomerleau O. A. What is hidden in the hidden layers? // Byte. 1989. Vol. 14. P. 227–233.
6. Minsky M. L., Papert S. A. Perceptrons, expanded edition. Cambridge, MA : MIT Press, 1988. 308 p.
7. Shynk J. J. Performance surfaces of a single-layer perceptron // IEEE Transactions on Neural Networks. 1990. Vol. 1. P. 268–274.
8. Hampshire J. B., Pearlmutter B. Equivalence proofs for multilayer perceptron classifiers and Bayesian discriminant function // Proceedings of the 1990 Connectionist Models Summer School. San Mateo, CA : Morgan Kaufmann, 1990. P. 159–172.
9. Webb A. R., Lowe O. The optimal internal representation of multilayer classifier networks performs nonlinear discriminant analysis // Neural Networks. 1990. Vol. 3. P. 367–375.
10. Hinton G. E. Deterministic Boltzmann machine learning performs steepest descent in weight-space // Neural Computation. 1989. Vol. 1. P. 143–150.
11. Hebb D. O. The Organization of Behavior: A Neuropsychological Theory. New York : Wiley, 1949. 378 p.

12. Rumelhart O. E., Hinton G. E., Williams R. J. Learning representations of back-propagation errors // *Nature*. 1986. Vol. 323. P. 533–536.
13. Watrous R. L. Learning algorithms for connectionist networks: Applied gradient methods of nonlinear optimization // *First IEEE Informational Conference on Neural Networks*. San Diego, CA. 1987. Vol. 2. P. 619–627.
14. Симс Ч. Т., Столофф Н. С., Хагель У. К. Суперсплавы II: Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок // М. : Металлургия, 1995. 384 с.
15. Roger C. Reed. *The Superalloys. Fundamentals and Applications*. Cambridge : University Press, 2006. 372 с.
16. Кузнецов В. П., Лесников В. П., Попов Н. А. Структура и свойства жаропрочных никелевых сплавов. Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2016. 164 с.
17. Каблов Е. Н. Литые лопатки газотурбинных двигателей. Сплавы, технология, покрытия. М. : МИСИС, 2001. 632 с.
18. Поллинг Л. Природа химической связи / Пер. с англ. М. Е. Дяткиной. Под ред. проф. Я. К. Сыркина. М. ; Л. : Госхимиздат, 1947. 440 с.
19. Хайкин С. *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. М. : Вильямс, 2017. 1104 с.
20. Larson R. R., Miller J. Time-temperature relationship for rupture creep stress // *Trans ASME*. 1952. Vol. 74, № 5. P. 765–775.
21. The application of neural network to the development of single crystal superalloys / Yoo Y. S. , Kim I. S., Kim D. H. [et al.] // *The Minerals, Metals & Materials Society*. 2004. P. 941–950.
22. The effect of long-term high-temperature heat treatment at 950 °C on the structure and mechanical properties of the zhs6u superalloy / A. G. Tyagunov , E. E. Baryshev [et al.] // *The Physics of Metals and Metallography*. 1998. Т. 86, № 1. P. 65–69.
23. Thermal stability of the structure of a high-temperature nickel alloy fabricated by two different technologies / A. G. Tyagunov, E. E. Baryshev [et al.] // *Metal Science and Heat Treatment*. 1999. Т. 41, № 11–12. P. 538–541.
24. Влияние высокотемпературной обработки расплава на структуру никелевого жаропрочного сплава ЭП539Л / А. Г. Тягунов,

- Т. К. Костина , В. П. Лесников [и др.] // Литейное производство. 1994. № 1. С. 13–14.
25. Tyagunov A., Milder O., Tarasov D. Application of Artificial Neural Networks for Prediction of Nickel-based Superalloys Service Properties Based on the Chemical Composition // WSEAS Transactions on Environment and Development. 2019. Vol. 15. P. 113–119.
26. Tyagunov A., Milder O., Tarasov D. Application of Artificial Neural Networks for the Replenishment of Nickel-based Superalloys Catalogues // European Conference on Electrical Engineering & Computer Science EECS. 2018. IEEE Explore, P. 41–44.

# Оглавление

---

<b>Введение .....</b>	<b>3</b>
-----------------------	----------

<b>Глава 1. Искусственные нейроны, сети и их биологические прототипы .....</b>	<b>4</b>
1.1. Биологический нейрон .....	4
1.2. Нейронная передача .....	6
1.3. Потенциал действия .....	7
1.4. Адаптация .....	8
1.5. Рефрактерный период .....	9
1.6. Скорость нейронной трансмиссии .....	9
1.7. Синаптические связи .....	10
1.8. Нейротрансмиттеры .....	11
1.9. Измерение потенциала действия .....	12
1.10. Сенсорно-нейронная передача .....	14
1.11. Искусственные нейроны и нейронные сети .....	16
1.12. Архитектура нейронной сети .....	16
1.13. Обучение в нейронных сетях .....	19
Контрольные вопросы к главе 1 .....	23

<b>Глава 2. Жаропрочные никелевые сплавы как объект моделирования .....</b>	<b>24</b>
2.1. Состав жаропрочных никелевых сплавов .....	24
2.2. Структура и способы упрочнения ЖНС .....	29
2.3. Свойства никелевых сплавов .....	32
2.4. Методы литья сплавов .....	33
2.5. Разупрочнение никелевых сплавов .....	34
Контрольные вопросы к главе 2 .....	35

<b>Глава 3. Жаропрочность и термостабильность сплавов на основе никеля и их моделирование посредством ИНС .....</b>	<b>36</b>
3.1. База данных сплавов, преобразования Ларсона — Миллера ...	40
3.2. Вычислительный эксперимент на основе ИНС .....	41
3.3. Преобразование входных данных .....	42

---

3.4. Выбор конфигурации и построение искусственной нейронной сети в пакете MATLAB .....	44
3.5. Выбор обучающего алгоритма и обучение (тренировка) сети .....	46
3.6. Валидация и верификация полученной корреляционной модели с использованием тестовой выборки .....	48
3.7. Расчет неизвестных значений жаропрочности. Зависимость разрывного усилия от условий испытания .....	50
3.8. Диаграмма распределения сплавов по их жаропрочности и термостабильности .....	54
Контрольные вопросы к главе 3 .....	59
<b>Заключение .....</b>	<b>60</b>
<b>Список библиографических ссылок .....</b>	<b>63</b>

*Учебное издание*

**Тягунов** Андрей Геннадьевич  
**Мильдер** Олег Борисович  
**Тарасов** Дмитрий Александрович  
**Сергеев** Александр Петрович

**ПРИМЕНЕНИЕ  
ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ  
В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**

Редактор О. В. Климова  
Верстка О. П. Игнатьевой

Подписано в печать 29.10.2021. Формат 70×100/16.  
Бумага офсетная. Цифровая печать. Усл. печ. л. 5,5.  
Уч.-изд. л. 4,1. Тираж 30 экз. Заказ 219.

Издательство Уральского университета  
Редакционно-издательский отдел ИПЦ УрФУ  
620049, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 5  
Тел.: +7 (343) 375-48-25, 375-46-85, 374-19-41  
E-mail: rio@urfu.ru

Отпечатано в Издательско-полиграфическом центре УрФУ  
620083, Екатеринбург, ул. Тургенева, 4  
Тел.: +7 (343) 358-93-06, 350-58-20, 350-90-13  
Факс: +7 (343) 358-93-06  
<http://print.urfu.ru>



